

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
CURSO DE GRADUAÇÃO EM FÍSICA LICENCIATURA**

Deisilaine da Silva Evaristo

**SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA DIFRAÇÃO DE LAUE E
RECONSTRUÇÃO DA REDE CRISTALINA**

São Cristóvão - SE
2019

Deisilaine da Silva Evaristo

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA DIFRAÇÃO DE LAUE E RECONSTRUÇÃO DA REDE CRISTALINA

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Departamento de Física da Universidade Federal de Sergipe, como requisito básico para conclusão do curso de Física Licenciatura.

Orientador: Prof. Dr. Osmar de Souza e Silva Júnior

São Cristóvão – SE
2019

DEISILAINE DA SILVA EVARISTO

**SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA DIFRAÇÃO DE LAUE
E RECONSTRUÇÃO DA REDE CRISTALINA**

Trabalho de Conclusão de Curso
apresentado à Universidade Federal de
Sergipe, como parte das exigências do
curso de Física Licenciatura, para a
obtenção do título de Licenciado em
Física.

Aprovado em 04 de Outubro de 2019



Prof. Dr. Osmar de Souza e Silva Júnior
Universidade Federal de Sergipe – UFS
Orientador



Prof. Dr. André Mauricio Conceição de Souza
Universidade Federal de Sergipe – UFS



Prof. Dr. Rogério Machado
Universidade Federal de Sergipe – UFS

SÃO CRISTÓVÃO - SE

2019

Agradecimentos

Primeiramente agradeço a Deus por me conceder forças para chegar até aqui, ao professor Osmar de Souza e Silva Júnior por me orientar neste trabalho de conclusão de curso por sua paciência e ensinamentos. Não tenho palavras para descrever minha gratidão por tudo quanto aprendi e pelo privilégio de participar de um projeto que fez parte de sua história.

Agradeço à Camila Peixoto, que disponibilizou programas e dados relativos à rede FCC, a partir dos quais construímos nossas rotinas do diamante.

Agradeço também aos meus professores do Departamento de Física Jhon Fredy Martinez Ávila, Nelson Orlando, Menilton Menezes, dentre outros.

Aos meus pais Rosângela e Domingos de Jesus Evaristo que sempre estão do meu lado apoiando-me de todas as maneiras.

Aos meus amigos Edson Bonfim, Suely Araújo dos Santos, José Edson de Souza, que tiveram um papel especial para minha trajetória até aqui.

Aos meus colegas de curso que ao longo do percurso tiveram um papel fundamental para esta conquista.

Aos professores Paulo Chaplin e Ana Gardênia que fizeram parte dessa trajetória e foram indispensáveis no meu processo de formação.

A meus irmãos Diego Evaristo, Rael Evaristo, Rafael Evaristo, Micael Evaristo, Gabriel Evaristo, Misael Evaristo, Kaik Evaristo e Marcus Kayllan Evaristo; enfim, a todos que mesmo não sendo citados de alguma forma contribuíram para que este trabalho fosse possível.

Sumário

1. Introdução.....	8
2. Interferência e Difração.....	9
2.1. Interferência.....	9
2.2 Difração	12
2.3 Difração de raios X.....	12
3. Estrutura Cristalina.....	14
3.1 A rede cristalina.....	14
3.2 Índices de Miller.....	14
3.3 A rede recíproca.....	15
4. Metodologia	16
5. Resultados e Discussão da Simulação da Difração de Laue.....	18
5.1 Dois átomos.....	18
5.2 N átomos numa linha.....	21
5.3 Rede bidimensional.....	23
5.4 Rede cúbica simples	26
5.5 Rede do diamante	35
6. Resultados e Discussão da Simulação da Rede Cristalina.....	43
7. Conclusões	47
8. Referências Bibliográficas	48

Resumo

Quando um cristal difrata um feixe de raios X, é gerado um padrão de Laue. Tal padrão é constituído por manchas de interferência construtiva. A disposição dessas manchas relaciona-se univocamente com aquela estrutura cristalina. Neste trabalho avaliamos um modelo teórico simples, usando-o de um lado para simular a interferência entre ondas difratadas pelos átomos de um dado cristal, o que dá origem a uma figura de difração. E, de outro lado, efetuamos a simulação reversa: partindo de um dado padrão de Laue, reconstruímos a rede cristalina que gerou aquela figura de difração. Obtivemos bons resultados na simulação da difração de raios X pelas estruturas cúbica simples e do diamante, e também conseguimos reconstruir a rede cúbica simples através da transformação inversa de Fourier.

Palavras-Chave: Difração de Laue, Simulação Computacional, Transformadas de Fourier.

Abstract

When a crystal diffracts an X-ray beam, a Laue pattern is created. Such a pattern consists of spots of constructive interference. The arrangement of these spots uniquely relates to that crystalline structure. In this work we evaluate a simple theoretical model using it, on one hand, to simulate the interference between waves diffracted by the atoms of a given crystal, which gives rise to a diffraction figure. And on the other hand we perform the reverse simulation: starting from a given Laue pattern, we reconstruct the crystal lattice that generated the diffraction pattern. We obtained good results by simulating X-ray diffraction by the simple cubic and diamond structures, and we were also able to reconstruct the simple cubic lattice by inverse Fourier transformation.

Keywords: Laue Diffraction, Computer Simulation, Fourier Transforms.

1. Introdução

Importantes descobertas foram feitas no século XIX, tendo grande impacto no mundo científico. Uma delas foi a descoberta dos raios X, em 1895, por Wilhelm Röntgen, a partir de experimentos com tubos de raios catódicos [1, 2]. Sua descoberta foi difundida muito rapidamente, sendo a radiografia sua principal aplicação, que passou a ser utilizada pelos hospitais e posteriormente na indústria. As experiências iniciais sugeriam que se tratava de ondas eletromagnéticas. Nessa mesma época, havia surgido a ideia de que em um sólido cristalino os átomos eram dispostos em um arranjo regular com espaçamento entre os átomos da mesma ordem de grandeza dos comprimentos de onda dos raios X. Em 1912, Max von Laue combinou essas duas ideias e propôs que um cristal poderia servir como uma espécie de rede de difração tridimensional para raios X.

Friederich, Knipping e Von Laue realizaram em 1912 as primeiras experiências de difração de raios X. Aplicando seus conhecimentos sobre a difração da luz, Laue conseguiu obter o primeiro diagrama de difração, utilizando o sulfato de cobre. A maioria dos raios X passou em linha reta pelo cristal, porém alguns raios X foram espalhados e formaram uma figura de interferência que ficou gravada em uma placa fotográfica. Através das experiências foi verificado que os raios X possuíam propriedades ondulatórias e que os átomos de um cristal eram agrupados em uma rede cristalina regular. Desde então, a difração de raios X se tornou uma ferramenta de grande importância, usada para medição do comprimento de onda dos raios X e também para o estudo da estrutura cristalina de moléculas complexas.

No método de Laue quando o cristal é atingido por um feixe de raios X, ele seleciona e difrata os valores discretos de comprimentos de onda para os quais o ângulo teta de reflexão por planos cristalinos paralelos, distando d entre planos consecutivos, satisfazem a lei de Bragg,

$$\lambda = 2 d \sin \theta.$$

A figura de difração formada consiste em uma série de pontos de interferência construtiva (as “manchas de Laue”), e a disposição dos pontos na

figura indicará o tipo de simetria do cristal. Tal método é bastante usado em experiências na física do estado sólido para a orientação de cristais.

Neste trabalho, avaliamos um modelo teórico simples usado para simular a interferência entre ondas difratadas pelos átomos de um dado cristal, o que dá origem a uma figura de difração. Neste sentido, vem a ser uma continuação e extensão do trabalho de SOUZA [3].

Elaboramos também a simulação reversa: partindo de um dado padrão de Laue, reconstruímos por simulação a rede cristalina que gerou aquela figura de difração.

Outro aspecto deste trabalho é que tais simulações podem ser vistas como ferramentas didáticas de ensino, contribuindo para uma melhor compreensão do fenômeno de interferência ocorrendo a nível microscópico, e da consequente formação das figuras de difração de Laue. O que é muito curioso e motivador: tais figuras, consistindo em manchas num filme sensível aos raios X, são *bidimensionais* e de dimensões *macroscópicas* (alguns centímetros quadrados); apesar disto, são ligadas (via transformada inversa de Fourier) à disposição *microscópica* dos átomos num arranjo *tridimensional* organizado.

2. Interferência e difração

2.1 Interferência

O termo interferência indica a superposição de duas ou mais ondas na mesma região do espaço [4, 5]. Quando isto ocorre, a onda resultante em qualquer ponto em um dado instante é determinada pelo princípio da superposição. Quando duas ondas estão em fase, uma se sobrepõe a outra e o resultado obtido é uma onda de amplitude maior que a original, como pode ser visto na figura 1, e é chamada de interferência construtiva.

Na figura 1, a onda resultante da combinação da onda 1 com a onda 2 tem a amplitude resultante dada pela soma das amplitudes individuais, ou o dobro da amplitude de cada onda, se estas forem iguais.

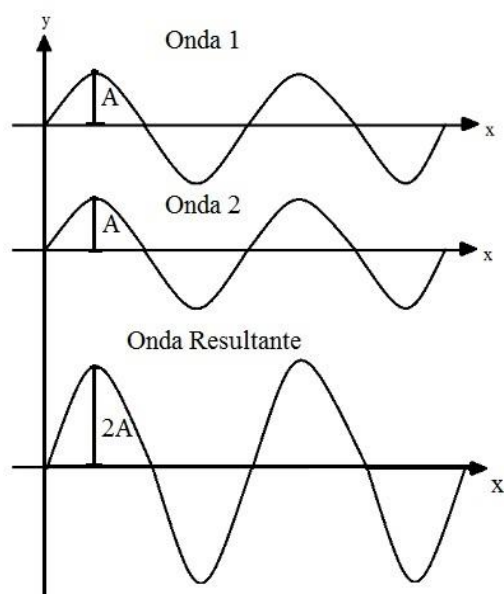


Figura 1: Interferência construtiva

Porém, quando duas ondas ao se sobreporem possuírem fases opostas, uma aniquila a outra, ocorrendo a interferência destrutiva. Veja a figura 2.

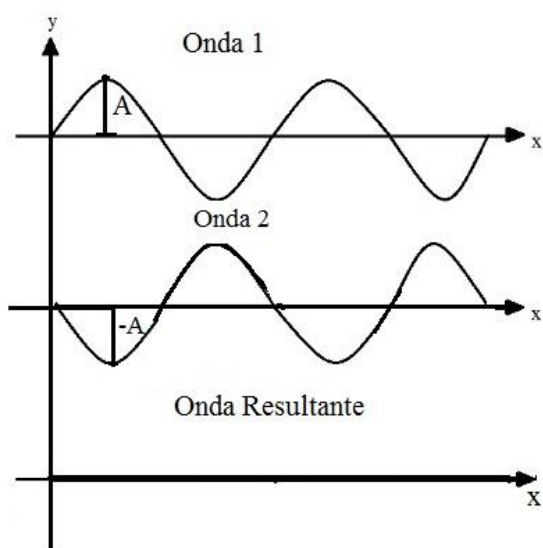


Figura 2: Interferência destrutiva

Em 1801, Thomas Young provou experimentalmente que a luz é uma onda, o oposto do que muitos cientistas da época pensavam. A luz proveniente das fendas incide sobre um anteparo e os pontos em que as ondas se reforçam (interferência construtiva) formam listas iluminadas, denominadas franjas claras, já os pontos em que as ondas se cancelam (interferência destrutiva) formam listas sem iluminação, denominadas franjas escuras. O conjunto de

franjas claras e escuras que aparece na tela é chamado figura de interferência e indica a superposição de duas ou mais ondas na mesma região do espaço.

O dispositivo experimental de Young pode ser visto na figura 3, que apresenta um “instantâneo” de uma única fonte de ondas e exibe as frentes de onda que correspondem às cristas das ondas (a distância entre duas cristas consecutivas é igual a um comprimento de onda; a figura não está em escala, sendo apenas qualitativa).

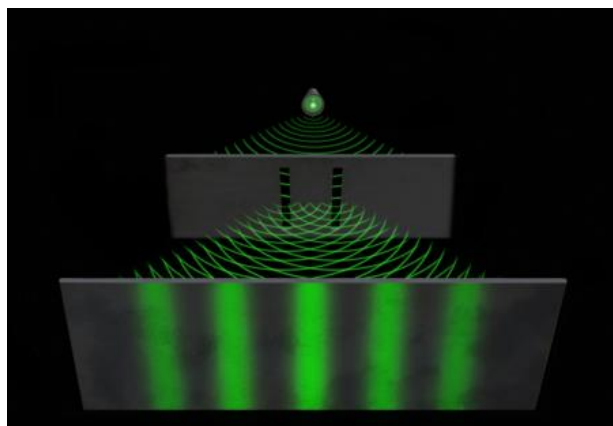


Figura 3: Difração e interferência da luz.

A intensidade da luz em qualquer ponto da tela de observação (à frente, na figura 3) depende da diferença entre as distâncias percorridas pelos raios de luz entre as fendas e o ponto considerado. Quando tal diferença é um número inteiro de comprimentos de onda, as ondas interferem construtivamente e a intensidade luminosa é máxima:

$$d \sin \theta = m\lambda, \text{ para } m = 0, 1, 2, \dots$$

(máximos; franjas claras).

Contudo, se a diferença é um número ímpar de meios comprimentos de onda, as ondas interferem destrutivamente e a intensidade luminosa é mínima:

$$d \sin \theta = \left(m + \frac{1}{2}\right)\lambda, \text{ para } m = 0, 1, 2, \dots$$

(mínimos; franjas escuras).

2.2 Difração

Quando uma onda incide sobre um obstáculo que possui uma abertura com dimensões próximas ao do comprimento de onda, parte dela ao passar pela abertura se alarga na região que fica do outro lado do obstáculo. Esse fato ocorre de acordo com o princípio de Huygens, que afirma que a própria frente de onda gera infinitas novas ondas a cada instante de tempo, a partir de cada um de seus pontos, dando origem a novas frentes de onda no instante seguinte. Tal fenômeno não se limita apenas às ondas luminosas, mas também pode ocorrer com todos os tipos de ondas.

A difração pode ser descrita como o desvio da luz ao encontrar um obstáculo, contudo o princípio que produz a difração da luz é o mesmo para qualquer tipo de onda. Quando partes de um feixe de onda são interrompidos por um obstáculo, é possível observar efeitos da difração provenientes da interferência entre as partes das ondas que não foram interrompidas. Na difração considera-se uma distribuição contínua de ondas secundárias de Huygens através da área de uma abertura ou um número muito grande de fontes e de aberturas. A difração das ondas que passam por duas fendas pode ser também observada na figura 3.

É importante introduzirmos também o conceito de rede de difração, que se denomina um conjunto com um grande número de fendas paralelas, todas com a mesma largura e com a mesma distância entre os centros de duas fendas consecutivas.

2.3 Difração de raios X

O fenômeno de difração de raios X ocorre quando os átomos de um cristal, difratando uma onda incidente (raios X), ocasionam um padrão de interferência, devido à organização do arranjo dos átomos, e ao espaçamento uniforme que existe entre os átomos [6, 7]. Observa-se que para que ocorra uma interferência construtiva das ondas espalhadas é preciso que a condição abaixo seja respeitada:

$$\lambda = 2 d \sin \theta.$$

No caso de difração por um cristal, a equação acima (lei de Bragg) deve ser aplicada a nível atômico, considerando espalhamentos da radiação por planos cristalinos paralelos. No experimento de Laue um feixe de raios X incide sobre um cristal, tendo por trás uma chapa fotográfica, similar ao aparato da figura 4. Ao analisar a chapa, Laue percebeu que nela se formava um padrão de difração. Experiências seguintes mostraram ainda que as simetrias exibidas nos espectros de difração estavam relacionadas com a orientação do cristal, e que a posição das manchas de difração era muito sensível a pequenas variações dessa orientação.

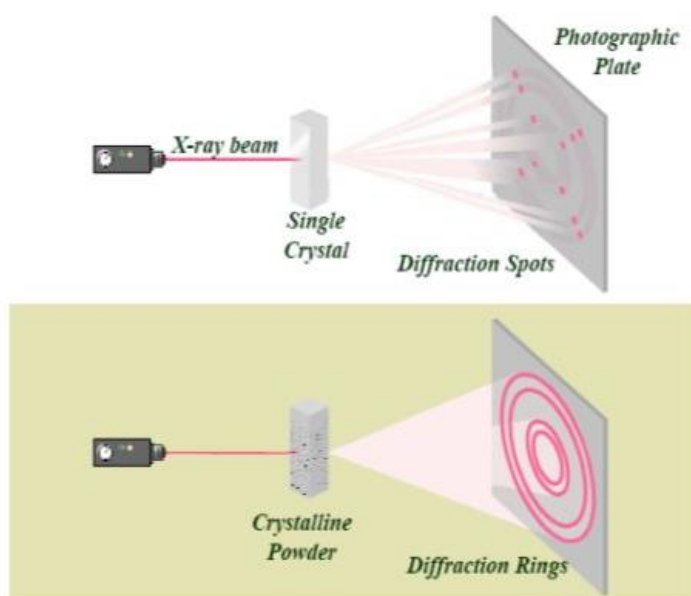


Figura 4: Difração de raios X [8].

W. L. Bragg realizou inúmeras experiências para explicar os resultados obtidos por Laue usando argumentos da natureza corpuscular, a fim de comprovar a teoria corpuscular defendida por seu pai. Porém, concluiu que de fato a natureza dos raios X era ondulatória. E, ao observar manchas de difração registradas em um filme, chegou à conclusão de que elas poderiam ser analisadas pela geometria, como reflexões da radiação incidente, dada a sua forma elíptica. Apesar de haver uma série de publicações de autoria dos Bragg, pai e filho, o artigo de W.L. Bragg, “*The Structure of some Crystals as Indicated by Their Diffraction of X-rays*” [9] se destaca por fazer uma análise

dos Lauegramas (figuras de difração de Laue) de KCl, KBr, KI, CaF₂ e ZnS, mostrando as diferenças existentes entre eles.

3. Estrutura Cristalina

3.1 A rede cristalina

Usando uma definição simples, cristais são arranjos atômicos ou moleculares cuja estrutura se repete de forma periódica e tridimensional [6, 7]. Um cristal é formado por diversas células unitárias arranjas tridimensionalmente, sendo a célula unitária a menor estrutura que representa um cristal; esse arranjo é também chamado de rede cristalina. Há células unitárias com sete tipos de simetria que se diferenciam pela relação entre seus parâmetros de rede. Os seis parâmetros de rede definem a célula unitária da seguinte forma: a , b e c indicam o comprimento dos três eixos, enquanto α , β e γ são os três ângulos existentes em um vértice da célula. A partir dos sete sistemas podemos obter as *redes de Bravais*, redes essas que levam o nome do cristalógrafo francês A. Bravais que em 1848 mostrou que na natureza só há catorze redes cristalinas, podendo ser vistas na figura 5.

3.2 Índices de Miller

A posição e a orientação de um plano num cristal são determinadas por três pontos pertencentes ao plano, desde que eles não sejam colineares. Para simplificar a representação de planos cristalinos, são utilizados três índices, h , k e l , conhecidos como índices de Miller, e correspondem ao inverso do valor em que o plano corta os eixos convencionais (multiplicado por um inteiro conveniente). Os índices h , k , l podem designar um único plano ou um conjunto de planos paralelos. A utilização dos índices de Miller para a representação de planos é prática por necessitar apenas de três índices (e não de expressões geométricas) para representar planos, e a inversão dos valores para a obtenção dos índices tem um significado geométrico.

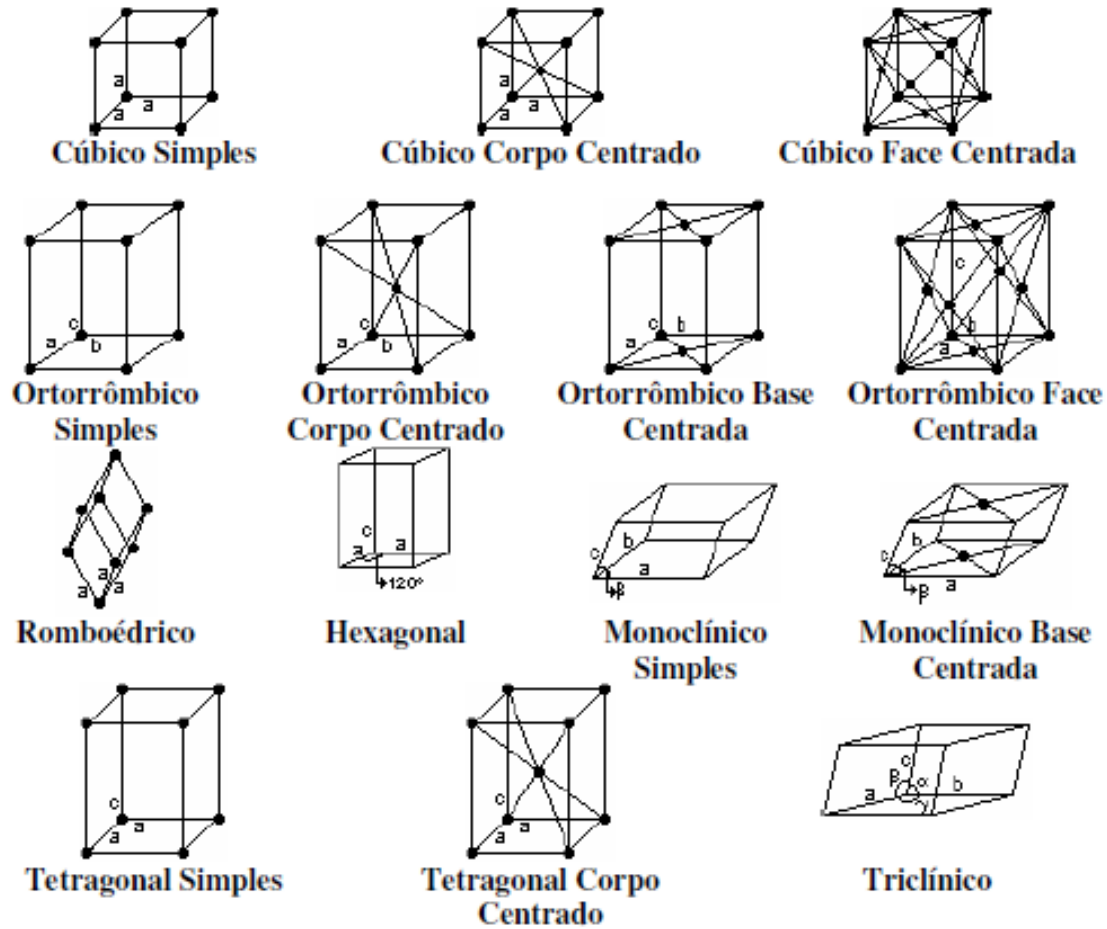


Figura 5: As catorze redes de Bravais espaciais ([6]).

3.3 A rede recíproca

Considere uma rede de Bravais definida pelo conjunto de pontos R tais que

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

em que \vec{a}_1, \vec{a}_2 e \vec{a}_3 são os vetores primitivos e n_1, n_2 e n_3 são números inteiros. O conjunto R define a periodicidade da rede de Bravais, ou seja, para cada R está associada uma operação de simetria de translação que deixa a rede invariante.

Considere agora uma função “onda plana” em três dimensões, $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$, onde \vec{k} é o vetor de onda ($|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$) e \vec{r} é uma posição qualquer do espaço. Para um vetor \vec{k} genérico, a onda plana não terá a mesma periodicidade da rede de Bravais definida por \vec{R} , ou seja, usando as mesmas operações de simetria a rede irá variar. Porém existe um subconjunto \vec{G} de vetores \vec{k} que tem a mesma

periodicidade da rede de Bravais. O conjunto de vetores de onda \vec{G} define uma rede num espaço vetorial complementar ao espaço real, chamado de espaço recíproco. A rede no espaço recíproco chama-se rede recíproca, e é também uma rede de Bravais, no espaço recíproco. Portanto, a rede recíproca é o conjunto de todos os vetores de onda \vec{G} tais que as correspondentes ondas planas $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ têm a mesma periodicidade da rede de Bravais.

Cada rede de Bravais \vec{R} tem sua rede recíproca \vec{G} correspondente. A rede de Bravais é definida como um conjunto de pontos no espaço real (dimensão de comprimento [L]), enquanto que a rede recíproca é formada por um conjunto de pontos no espaço dos vetores de onda (dimensão de [1/L]), também conhecido como espaço recíproco ou espaço k.

A rede recíproca é uma rede de Bravais. Vamos propor os seguintes vetores \vec{b}_1, \vec{b}_2 e \vec{b}_3 , construídos a partir dos vetores primitivos da rede de Bravais, \vec{a}_1, \vec{a}_2 e \vec{a}_3 , e a rede recíproca pode ser definida como:

$$\vec{G} = m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2 + m_3 \vec{b}_3$$

com m_1, m_2 e m_3 inteiros e \vec{b}_1, \vec{b}_2 e \vec{b}_3 dados por:

$$b_1 = 2\pi \frac{a_2 \times a_3}{a_1 \cdot (a_2 \times a_3)}; \quad b_2 = 2\pi \frac{a_1 \times a_3}{a_2 \cdot (a_1 \times a_3)}; \quad b_3 = 2\pi \frac{a_1 \times a_2}{a_3 \cdot (a_1 \times a_2)} .$$

4. Metodologia

Num modelo simples, supomos que os átomos reemitem a radiação X na forma de ondas esféricas (espalhamento Rayleigh), e considerou-se a somatória das ondas devidas a cada um dos átomos posicionados na estrutura cristalina (finita) considerada, isto é, calculou-se o resultado de sua interferência. Utilizamos a transformação de Fourier que liga a densidade eletrônica $n(\mathbf{r})$ à distribuição dos vetores de onda $n(\mathbf{k})$ [6],

$$n(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\text{Toda a rede}} \mathbf{e}^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \mathcal{F} n(\mathbf{r}),$$

com os N átomos supostos pontuais:

$$n(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2) + \dots + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_N).$$

O cálculo da transformada de Fourier desta densidade $n(\mathbf{r})$ envolvendo os deltas de Dirac fornece:

$$n(\mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_2} + \dots + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_N}.$$

Esta expressão é a base para as rotinas computacionais de simulação da difração de Laue, DifraSc.f e DifraDia.f (respectivamente, para a rede cúbica simples e para a rede do diamante). Tais rotinas foram escritas na linguagem de programação Fortran.

Numa segunda parte, objetivamos reconstruir a estrutura cristalina, também em simulação computacional, a partir de figuras de Laue para algumas estruturas cristalinas básicas, usando para tanto a transformação inversa de Fourier,

$$n(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \mathbf{e}^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} n(\mathbf{k}) d\mathbf{k} = \mathcal{F}^{-1} n(\mathbf{k}),$$

e consideraremos em nosso modelo

$$n(\mathbf{k}) = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) + \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_2) + \dots + \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_N),$$

equação esta que, substituída na expressão da transformada inversa, fornece:

$$n(\mathbf{r}_0) = e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_0} + e^{-i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_0} + \dots + e^{-i\mathbf{k}_N \cdot \mathbf{r}_0}.$$

Esta expressão é a base para a rotina computacional de simulação da rede cristalina a partir de diagramas de Laue, Rede.f. As simulações da rede cristalina também foram testadas quanto à variação do comprimento de onda

da radiação X que produziu as figuras de Laue, e quanto ao número de manchas inseridas como *input*.

Os programas que serviram de base para a simulação computacional baseados nas expressões acima incluíam *loops* para varrer toda a grade no anteparo, *loops* para cobrir todos os átomos do cristal, e definição das coordenadas dos átomos para cada tipo de estrutura tratada.

Para a primeira parte do trabalho, que consistia em obter as manchas de Laue através da estrutura cristalina, usamos um programa básico em Fortran [10] com subrotinas específicas para cada estrutura utilizada. Para cada execução de tal programa, existia um arquivo de entrada “in.dat” com algumas informações como: número de átomos, distância cristal-anteparo, distância entre átomos, e o comprimento de onda adotado. Para executar os programas usamos o *prompt* de comando do Windows, gerando um arquivo de saída “out.dat” com as intensidades para cada ponto (x, y) do anteparo. O aplicativo usado para gerar as figuras foi o Gnuplot, no qual era possível selecionar valores de intensidade desejada.

Já na segunda parte que consistia em reproduzir a estrutura cristalina através das manchas de Laue, para cada execução do programa, usava-se um arquivo de entrada (“fig_Laue.dat”) contendo informações dos pontos ou manchas de Laue no anteparo, gerando um arquivo de saída (“rede.dat”) com a densidade eletrônica $n(r)$ para cada x, y, z. Com estes dados gerados, reproduzimos a (simulação da) rede por meio do Gnuplot.

Bancos de dados de dados cristalográficos, além do interessante trabalho de ênfase experimental de LIMA [11] sobre a difração de Laue, subsidiaram a comparação de nossas simulações com a experiência.

5. Resultados e Discussão da Simulação da Difração de Laue

5.1 Dois átomos

Iniciamos a simulação computacional da difração de Laue considerando apenas dois átomos, o que traz alguma semelhança com o espalhamento pela fenda dupla (a rigor, trata-se da interferência de duas fontes pontuais). A análise foi realizada supondo que a tela estava a uma certa distância do

“cristal” ($Z_2 = 10$ cm) e que os dois átomos estavam posicionados na direção x (figuras 6 e 7), distando $DIST = 1 \text{ \AA}$ (Angstrom) entre si. A tela ou anteparo, quadrada de lado 20 cm, foi dividida através de uma grade de dimensão GRID (GRID = 1 mm), sendo calculada nestes pontos da grade a interferência das ondas difratadas pelos dois átomos (supostas ondas esféricas, com comprimento de onda λ). Consideramos em nossas simulações vários valores do comprimento de onda, geralmente menores que a distância entre os átomos.

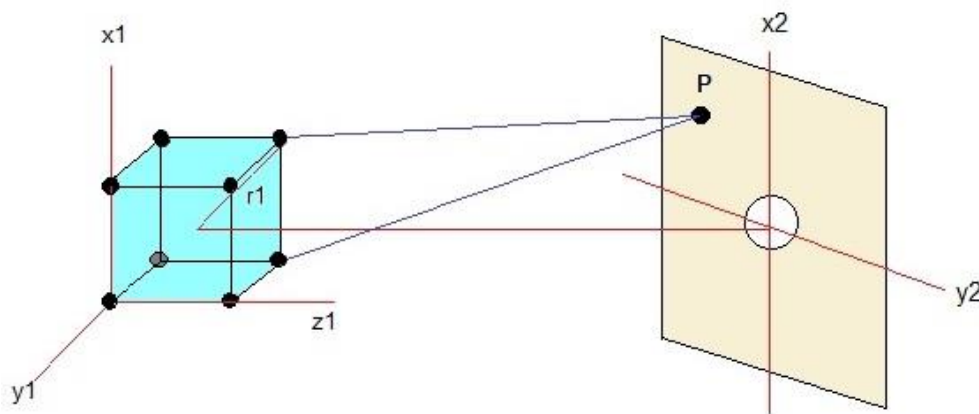


Figura 6: Geometria do cristal e anteparo.

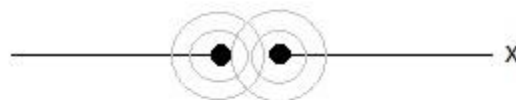


Figura 7: Espalhamento de raios X por dois átomos.

Na simulação da figura 8, mostramos as intensidades em cada ponto do anteparo (da grade escolhida). Tal intensidade, no diagrama 3D, é exibida no eixo vertical, e podemos ver as superfícies curvas com valores significativos de intensidades. Nesta figura em particular, usou-se o comprimento de onda $\lambda = 0,3 \text{ \AA}$.

Mostraremos também, com mais detalhes, o valor da intensidade em função da coordenada x (lembramos que os dois átomos encontram-se dispostos paralelamente a essa direção), veja as figuras 9 e 10.

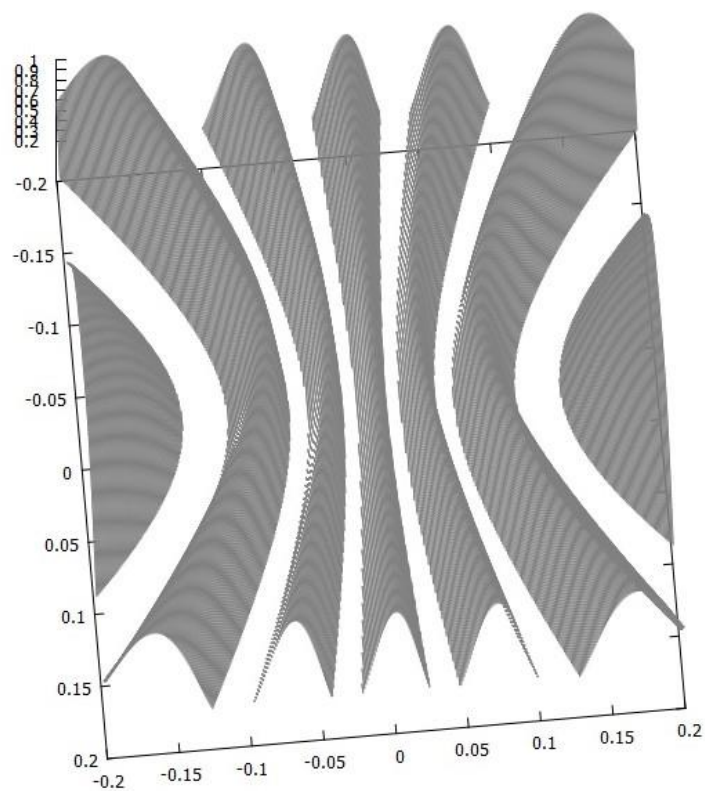


Figura 8: Intensidade do espalhamento por dois átomos, $ALBD=0,3 \text{ \AA}$.

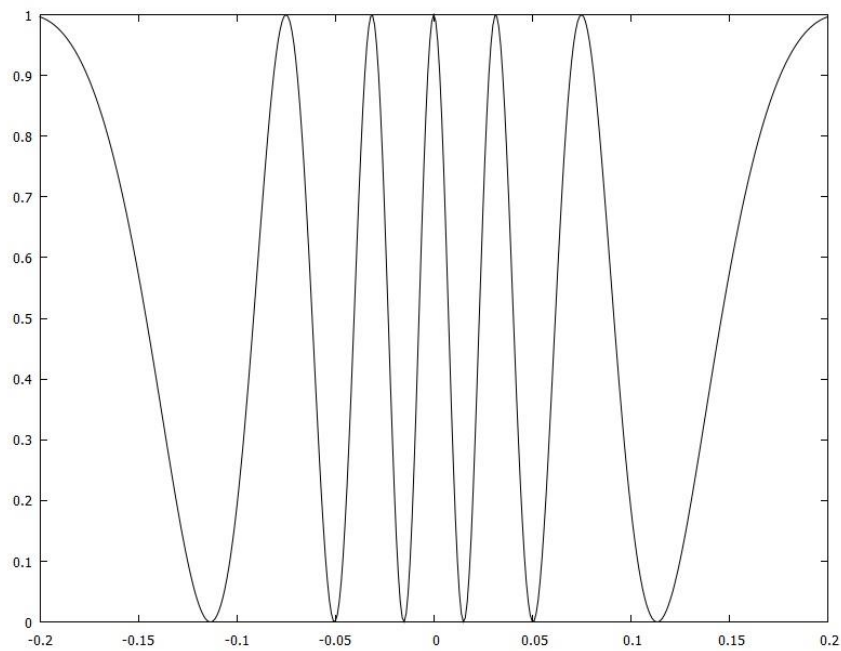


Figura 9: Intensidade versus direção x para $ALBD=0,3 \text{ \AA}$.

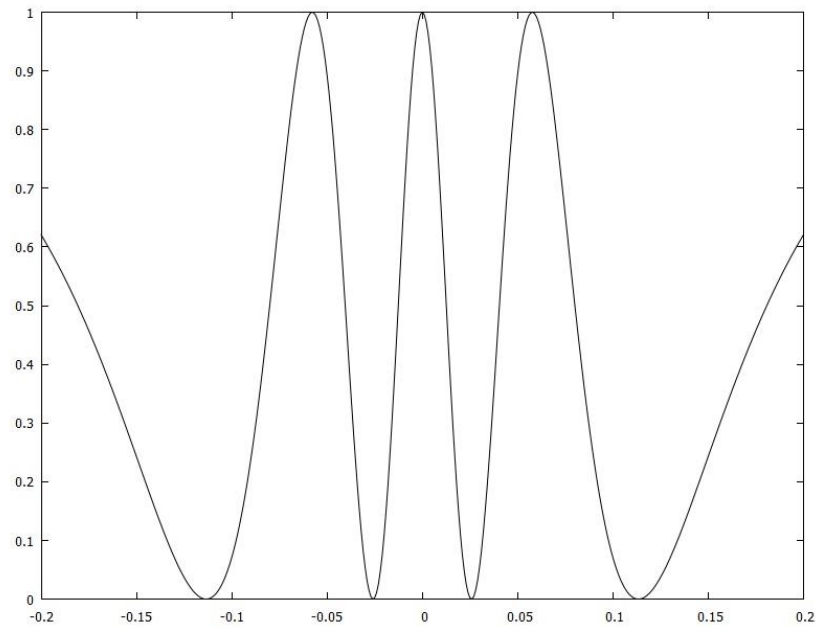


Figura 10: Intensidade versus direção x para $ALBD=0,5 \text{ \AA}$.

Notamos que o número de máximos na direção x depende do comprimento de onda; quanto menor ALBD, maior o número de máximos (ou de curvas como as mostradas na figura 8).

5.2 N átomos numa linha

Fizemos também a simulação computacional da difração de Laue para N átomos equidistantes, similar à de uma rede de difração (figura 11). Supusemos que os átomos ($N = 101$) estavam posicionados em uma linha, na direção x, com distâncias iguais ($DIST = 1 \text{ \AA}$) entre eles.



Figura 11: Rede linear.

As figuras 12 e 13 adiante ilustram as intensidades obtidas na simulação da difração de raios X por tal “cristal”, num gráfico tipo 3D, para os comprimentos de onda típicos de $0,3$ e $0,5 \text{ \AA}$.

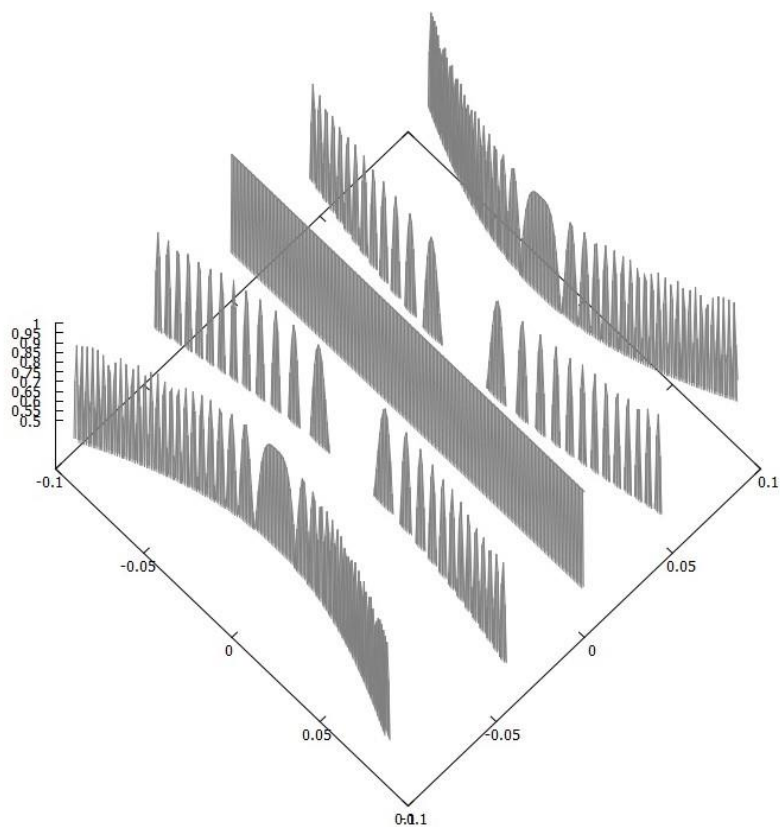


Figura 12: N átomos ao longo do eixo x , $ALBD = 0,3 \text{ \AA}$

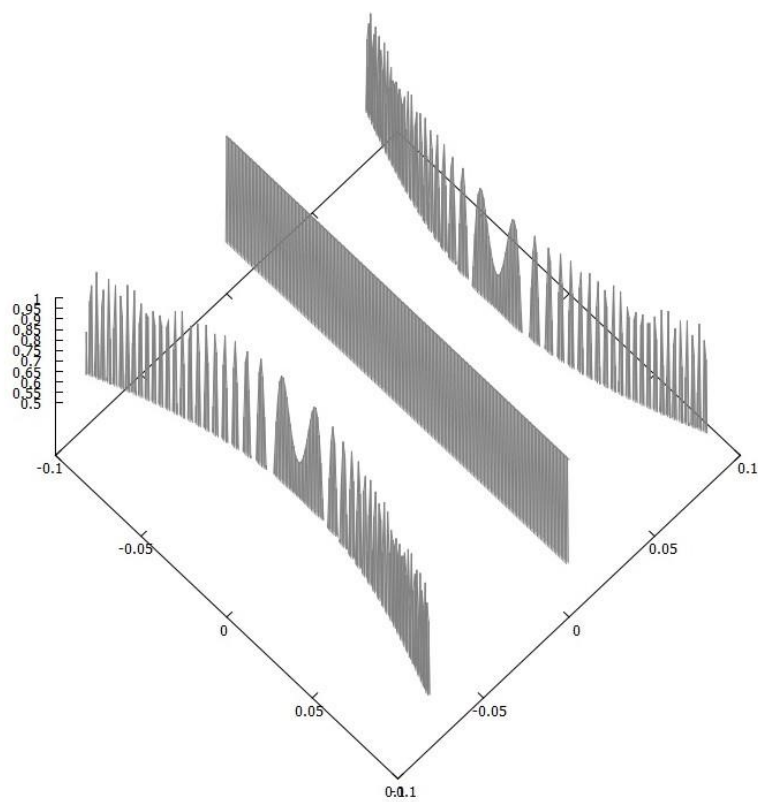


Figura 13: N átomos ao longo do eixo x , $ALBD = 0,5 \text{ \AA}$.

Notamos que, comparado com o caso de dois átomos, as superfícies viram (quase) superfícies verticais, e a intensidade varia, mesmo nelas. O plano correspondente a $x = 0$ exibe em todos os pontos a intensidade máxima; corresponderia ao “máximo central” no linguajar da física das ondas (clássica).

Apresentamos também o gráfico (figura 14) da intensidade *versus* x no caso da rede de difração linear, para o comprimento de onda $\lambda_{LBD} = 0,5 \text{ \AA}$. Observando desde o ponto de vista do eixo x apenas, notamos três máximos muito estreitos no intervalo exibido, contrastando com os picos exibidos na figura 10 (caso de dois átomos apenas).

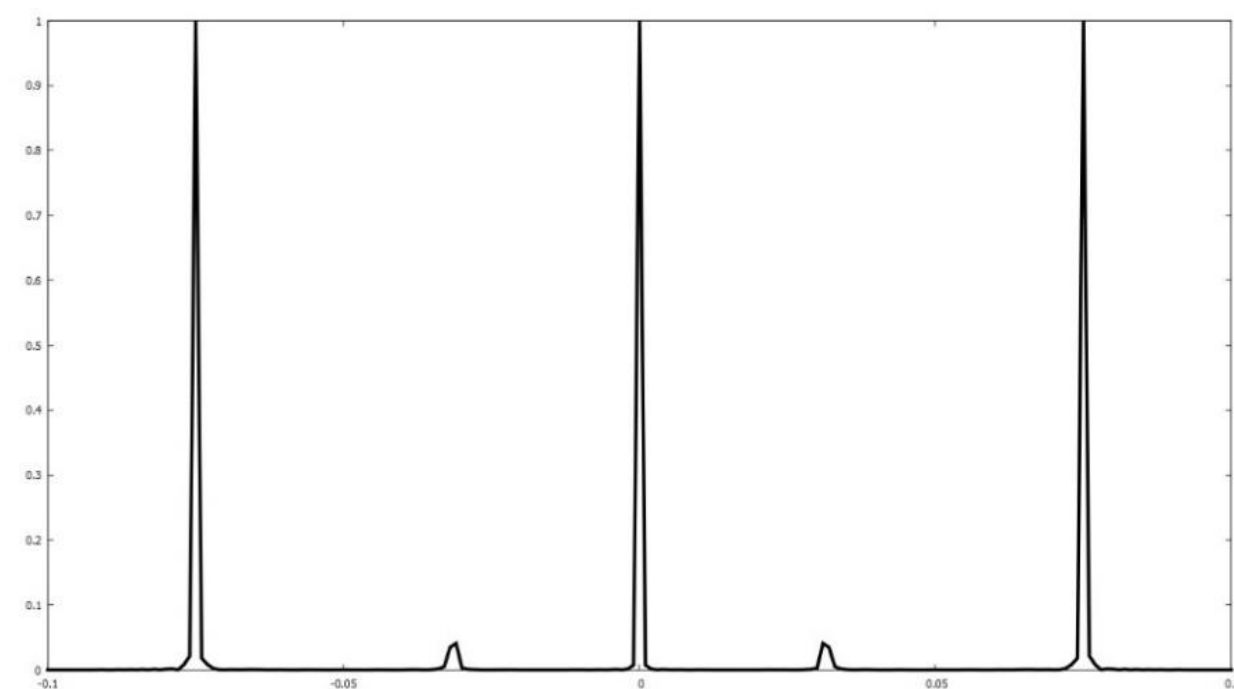


Figura 14: Intensidade versus direção x para $\lambda_{LBD}=0,5 \text{ \AA}$.

5.3 Rede bidimensional

Fizemos ainda a simulação computacional da difração de Laue para uma rede bidimensional (posicionada no plano xy , portanto perpendicular à direção de incidência dos raios X). Neste caso supomos que os átomos estavam colocados numa grade retangular (veja a figura 15).

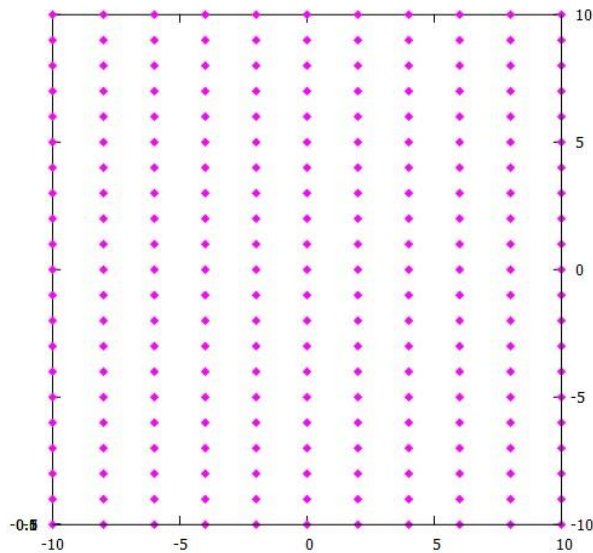


Figura 15: Átomos numa rede bidimensional.

Observe nesta figura 15 que a disposição dos átomos forma retângulos *horizontais*, isto é, com lado maior (2 \AA) na direção x, e lado menor (1 \AA) na direção y.

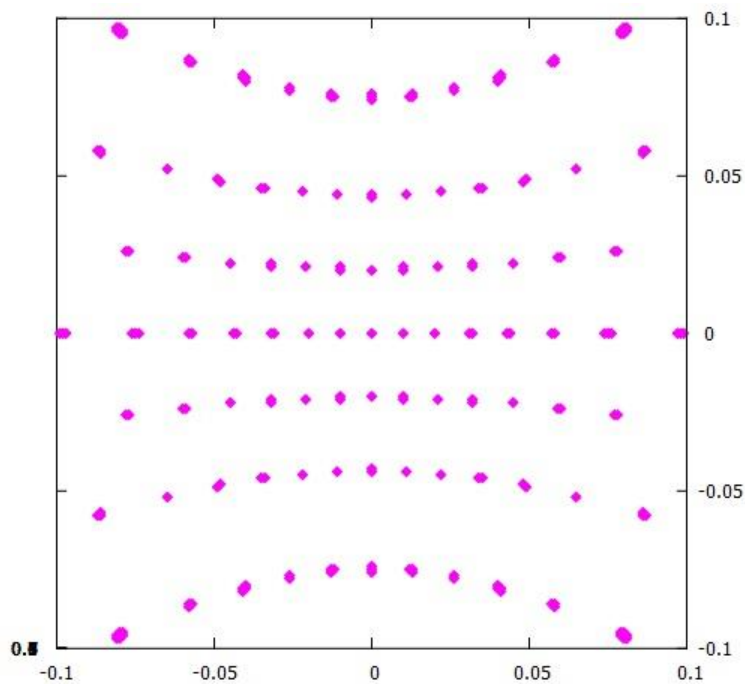


Figura 16: Rede 2D e comprimento de onda de $0,2 \text{ \AA}$.

A simulação mostra que a figura de interferência gerada (figura 16) apresenta retângulos *verticais*. Há uma distorção em virtude da tela ser plana, o que “puxa” a figura em direção aos cantos.

Exibimos também (figura 17) a simulação da mesma rede bidimensional, agora espalhando radiação X de $\text{ALBD} = 0,3 \text{ \AA}$; o número de pontos (máximos) diminui, em relação ao caso $0,2 \text{ \AA}$, como já havíamos observado antes para os casos de dois átomos e da rede de difração linear.

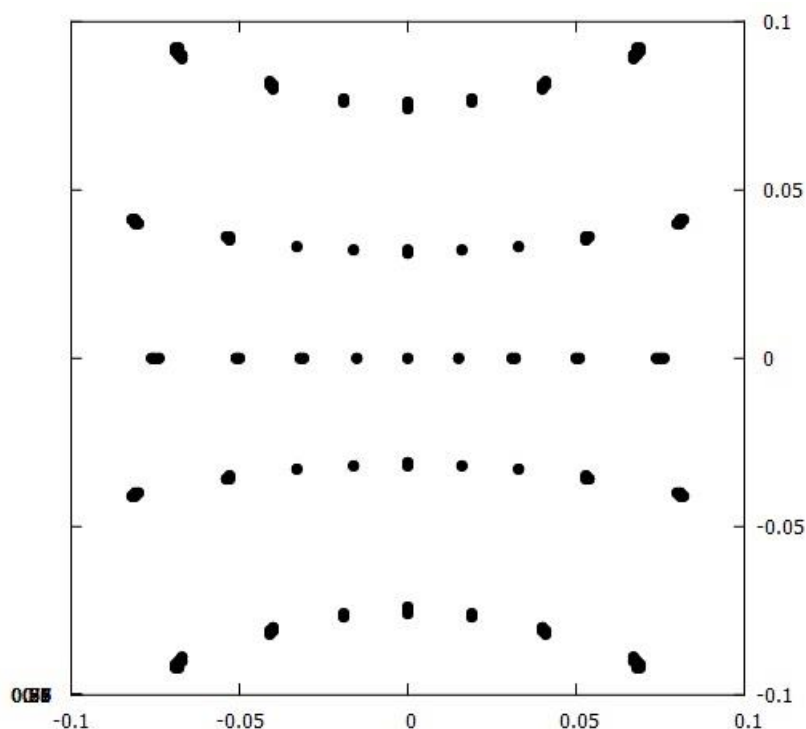


Figura 17: Rede 2D e o comprimento de onda de $0,3 \text{ \AA}$.

Variações testadas com diferentes números de átomos forneceram resultados semelhantes. No entanto, na medida em que aumentamos o número de átomos, as manchas pareciam ficar mais estreitas.

Para mostrar como as manchas de interferência construtiva são bem localizadas (quase pontuais), apresentamos na figura 18 a simulação da difração por rede bidimensional com $\text{ALBD} = 0,5 \text{ \AA}$, agora num gráfico tipo 3D com a intensidade no eixo “vertical”. Aqui usamos 10201 átomos ao todo, distantes um (ou dois) \AA uns dos outros (primeiros vizinhos).

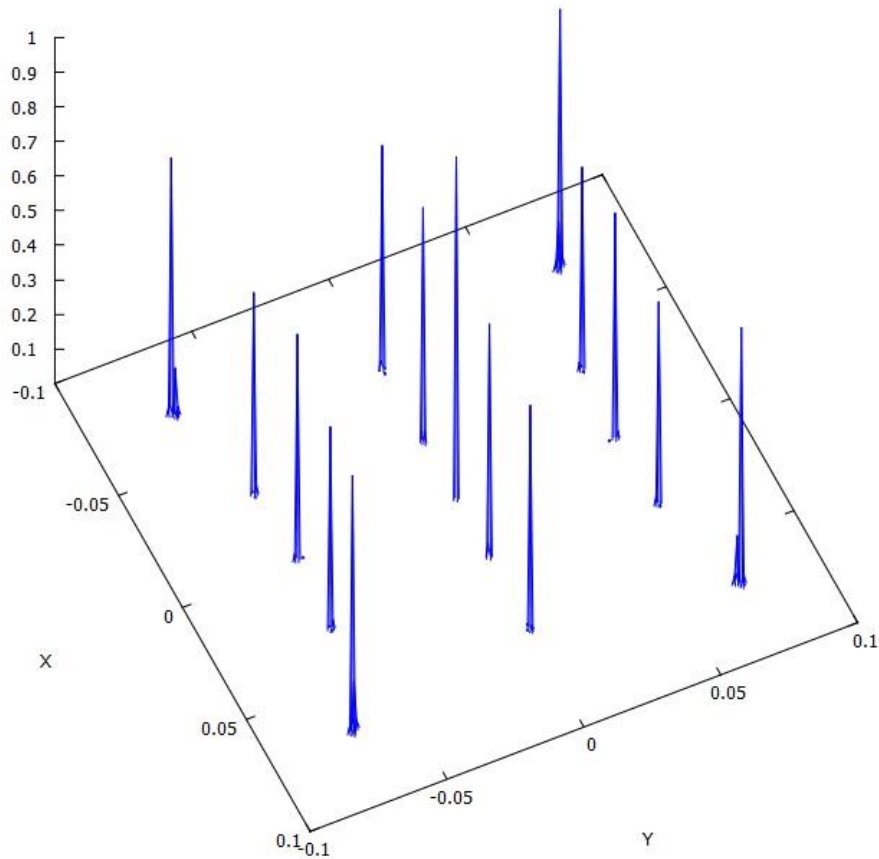


Figura 18: Intensidade em cada ponto do anteparo, para uma rede 2D.

5.4 Rede cúbica simples

Analisaremos agora a simulação computacional da difração de Laue a partir da rede cristalina cúbica simples (figura 3). Na literatura da área, esta rede é indicada como SC, *simple cubic*. Foram feitas várias simulações, variando o número de átomos do cristal e também o comprimento de onda do raio X incidente.

Executamos a rotina computacional DifraSc.f, que tenta simular a formação das figuras de difração de Laue, para vários comprimentos de onda da radiação X incidente, e para variados "tamanhos" da rede cúbica simples, desde um conjunto de apenas oito células convencionais ($NQ = 1$), com 27 átomos, até um cristal com aproximadamente um milhão de átomos ($NQ = 49$). Os átomos, que segundo nosso modelo espalham o raio X incidente formando

ondas secundárias esféricas, foram dispostos sempre simetricamente em relação à origem.

Iniciamos fazendo comentários gerais sobre os resultados simulados, e depois vamos apresentar resultados selecionados, extraídos da grande quantidade de dados e gráficos gerados neste TCC, para ilustrar aspectos relevantes.

De modo geral observamos que, em todos os casos simulados, a figura de interferência gerada apresenta *corretamente* as simetrias da rede cúbica simples, como invariância por rotações de noventa graus e reflexões em relação aos planos xz e yz (e também em relação a um plano mediano em relação a eles).

O arquivo de saída, “out.dat”, apresenta uma grade de valores X2, Y2 de pontos do anteparo e as intensidades luminosas em cada um desses pontos, decorrentes da interferência das ondas espalhadas por todos os átomos considerados. Observa-se que a maioria dos pontos está associada a uma intensidade bastante baixa, ou seja, estão mais próximos da situação de interferência destrutiva. No entanto, alguns pontos apresentam intensidades significativas, saltando à vista a intensidade máxima (que normalizamos a um) geralmente apresentada pelo ponto central do anteparo (chamaremos de máximo central). Sabemos que, do ponto de vista experimental, tal ponto central apresenta uma intensidade de radiação X tão alta que precisa ser excluído da chapa sensível onde se recolhe o padrão de Laue, não apenas pela interferência construtiva a que nos referimos, mas também pela radiação transmitida ao longo do cristal (sem ser espalhada).

Para a rede cúbica simples, supomos que o cristal estava a uma distância de 10 cm do anteparo ($ZL = 0,1$ m) e que os átomos no cristal estavam a uma distância de, digamos, $1,0 \text{ \AA}$. Como mostrado na figura 19, a grade no anteparo teria 0,001 metros; usamos a variável GRID para especificar essa distância.

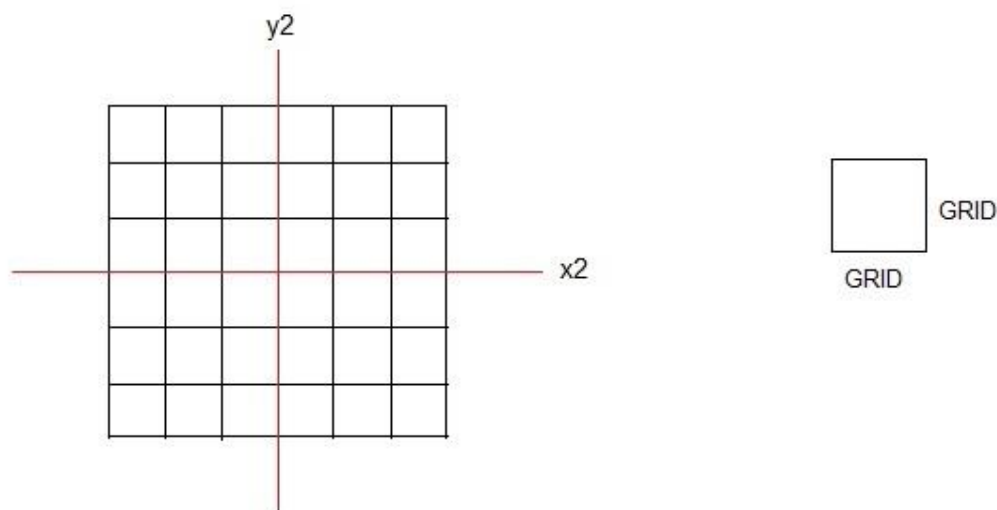


Figura 19: ilustração da divisão do anteparo em uma grade.

Para obter o número de pontos no anteparo usamos a expressão $(2 * NQA + 1)^2$. O número de pontos no anteparo seria de 40401, pois o NQA usado para todos os casos foi igual a 100. Já para encontrar o número de átomos no cristal usamos a seguinte expressão $(2 * NQ + 1)^3$, que depende do NQ usado (figura 20).

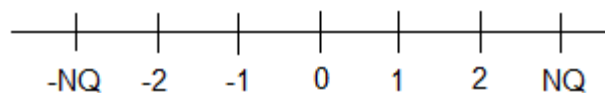


Figura 20: ilustração para encontrar o número de átomos.

Iniciamos adotando um comprimento de onda da radiação X da ordem de um décimo do parâmetro de rede (digamos, 0,1 Å).

No caso de $NQ = 1$, o número de átomos (colocados simetricamente em relação à origem) seria 27. Como a grade do anteparo tinha 0,001 metros e definimos que o NQA seria 100, ou seja, o número de pontos no anteparo a partir do centro até a borda nas duas direções, as coordenadas no anteparo iriam variar de -0,1 m até 0,1 m (100 x 0,001).

Nas simulações com valores baixos de NQ, selecionamos um valor mínimo referencial ao redor de $REF = 0,5$, exibindo no diagrama simulado da

difração apenas aqueles pontos com intensidades maiores ou iguais a REF. Por exemplo, na figura 21 mostramos o padrão de Laue simulado para a difração de raios X de comprimento de onda igual a um décimo do parâmetro de rede da estrutura SC. O pequeno cristal neste caso é constituído por 27 átomos ($NQ=1$).

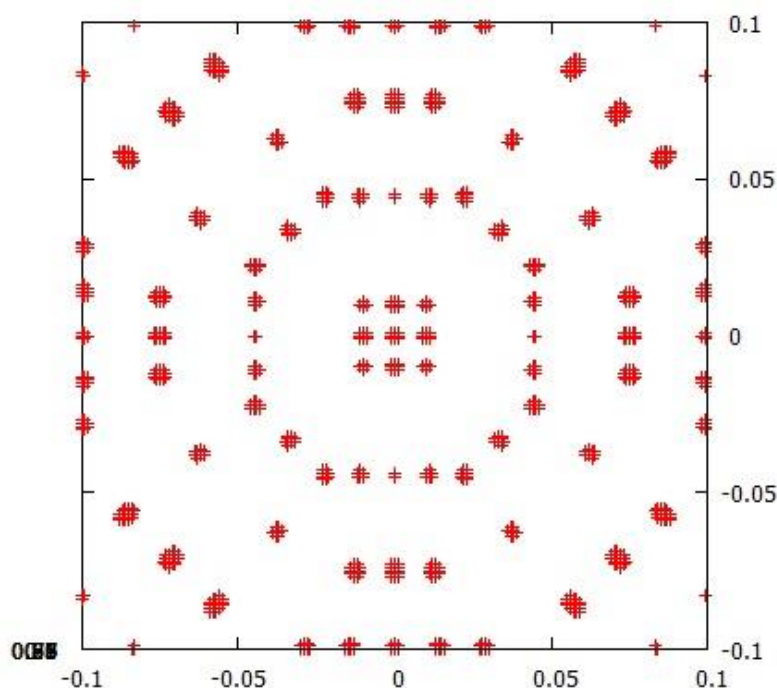


Figura 21: Rede SC, $NQ = 1$, $REF = 0,5$.

Na medida em que permitimos o crescimento de NQ (e, portanto, o número de átomos do cristal simulado), porém, para exibir algum ponto além do máximo central fomos obrigados a selecionar valores menores de REF. Por exemplo, para $NQ=10$ (ao redor de 10.000 átomos) usamos $REF = 0,001$; para $NQ = 49$ (um milhão de átomos), $REF = 10^{-6}$. Isto talvez esteja reproduzindo corretamente a dificuldade que os físicos experimentais têm de colher as figuras de Laue, pois como dissemos, excluída a região central do anteparo, a produção das outras manchas de Laue necessita da exposição do filme por várias horas, ou até dezenas de horas (conferir, por exemplo, no trabalho de LIMA [11]).

Outro aspecto observado, juntamente com o aumento do número de átomos do cristal simulado, foi que algumas manchas ficaram preservadas, mas outras evoluíram, ou diminuíram, ou mesmo desapareceram com o crescimento de NQ. Como exemplo disso, mostramos nas figuras 22 (NQ = 3, com 343 átomos), 23 (NQ = 5, com 1331 átomos no cristal) e 24 (NQ = 10, com 9261 átomos) que pontos na parte central do anteparo vão gradativamente desaparecendo, comparado com a figura 21. Já outros pontos formando uma espécie de “primeiro anel” ao redor da região central, se estabilizam.

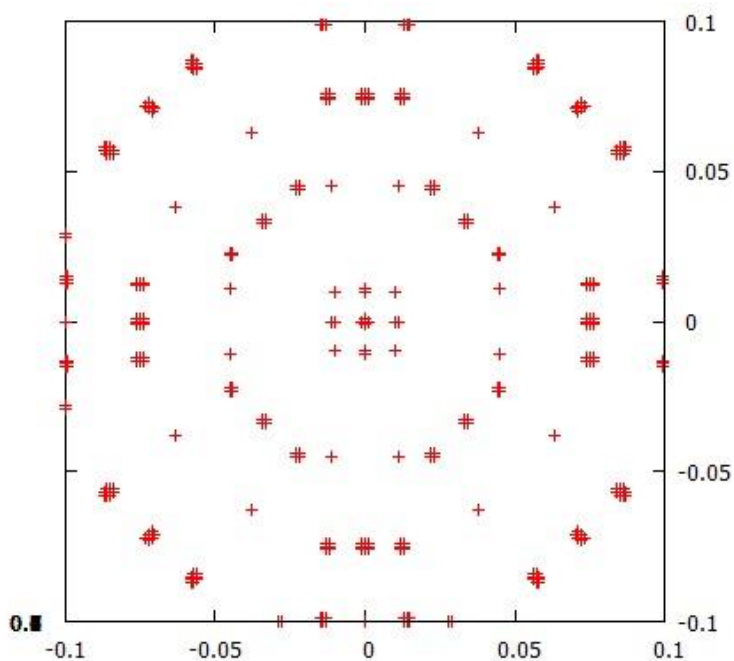


Figura 22: SC, NQ = 3, REF = 0,1.

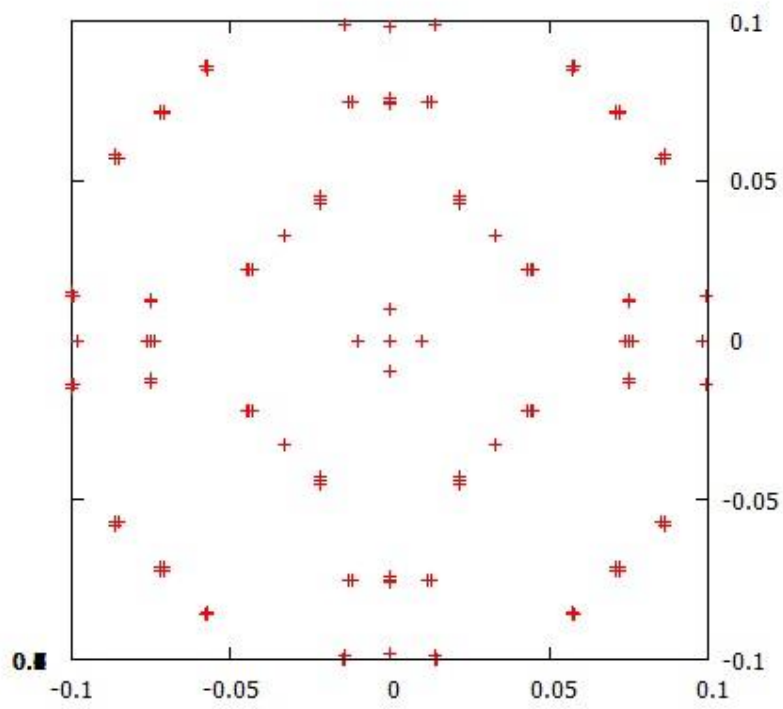


Figura 23: SC, $NQ=5$, $REF = 0,03$.

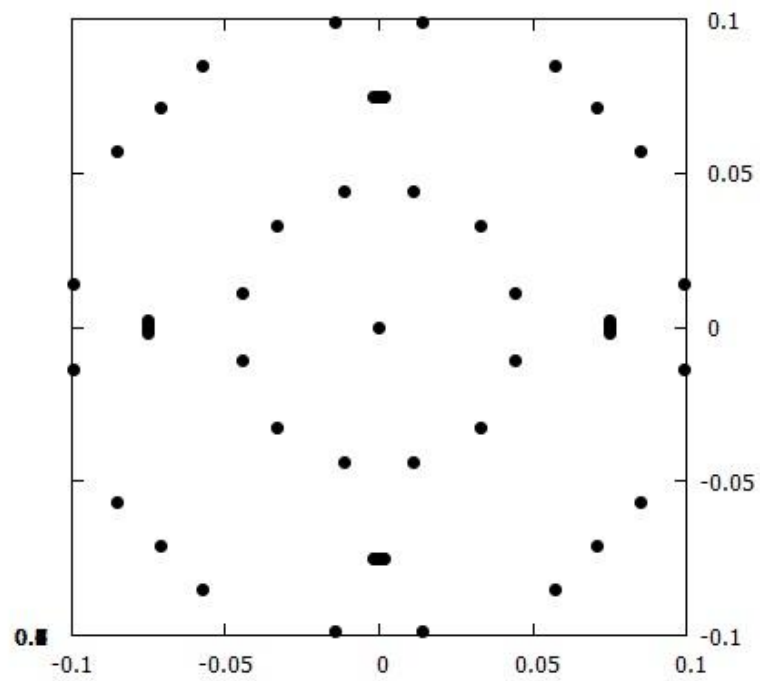


Figura 24: SC, $NQ = 10$, $REF = 0.007$.

Utilizamos em nossos cálculos comprimentos de onda (no programa, descritos pela variável ALBD) desde um décimo do parâmetro de rede (no caso SC, a dimensão da célula cúbica) até algumas vezes seu comprimento. Notamos, falando novamente em termos gerais, que um aumento de comprimento de onda tem um efeito de "focar" no anteparo: figuras com comprimentos de onda maiores parecem passar uma lente de aumento sobre as figuras com ALBD menores, detalhando a parte central e perdendo os pontos periféricos (que caíam fora do anteparo nestes casos). Isto já havia sido observado na simulação da rede bidimensional.

É o que se nota na figura 25, para $NQ = 3$ e $ALBD = 0,2 \text{ \AA}$. A região central do caso $ALBD = 0,1$ (figura 22), bem como o primeiro anel, se repetem, porém em forma expandida, e os pontos além do primeiro anel praticamente caem fora do anteparo.

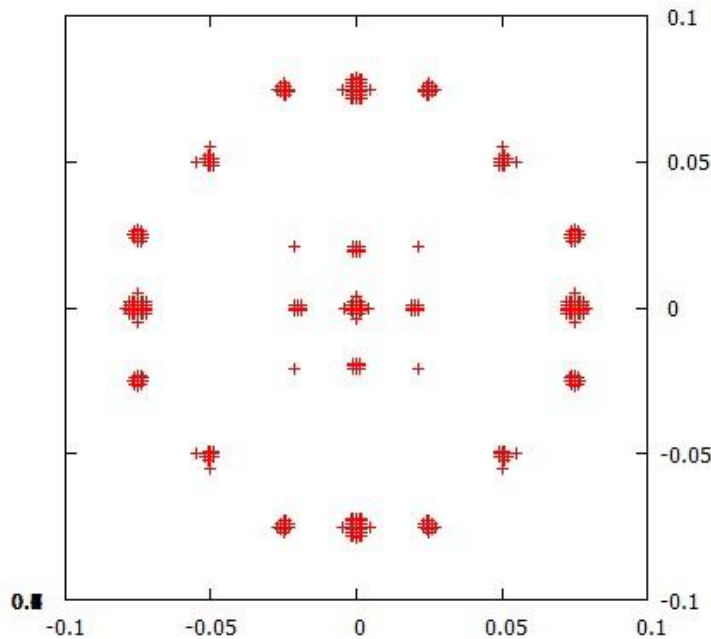


Figura 25: SC, $NQ = 3$, $ALBD = 0,2 \text{ \AA}$, $REF = 0.05$.

Mostramos também, na figura 26, a simulação com $ALBD = 0,2 \text{ \AA}$ e $NQ=5$, que deve ser comparada com a figura 23.

Na figura 27, o caso $NQ=10$, $ALBD = 0,2 \text{ \AA}$.

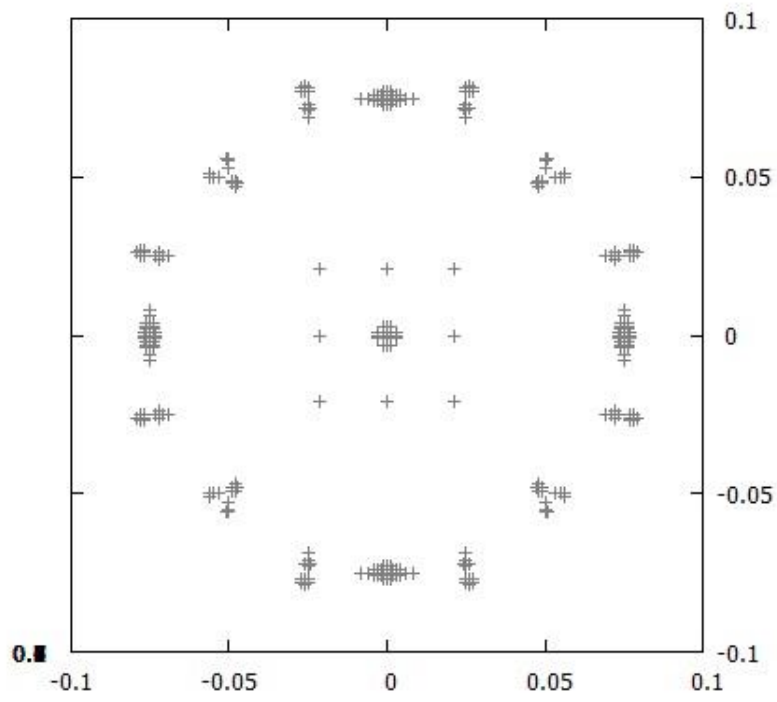


Figura 26: SC, $NQ = 5$, $ALBD = 0,2 \text{ \AA}$, $REF = 0.01$.

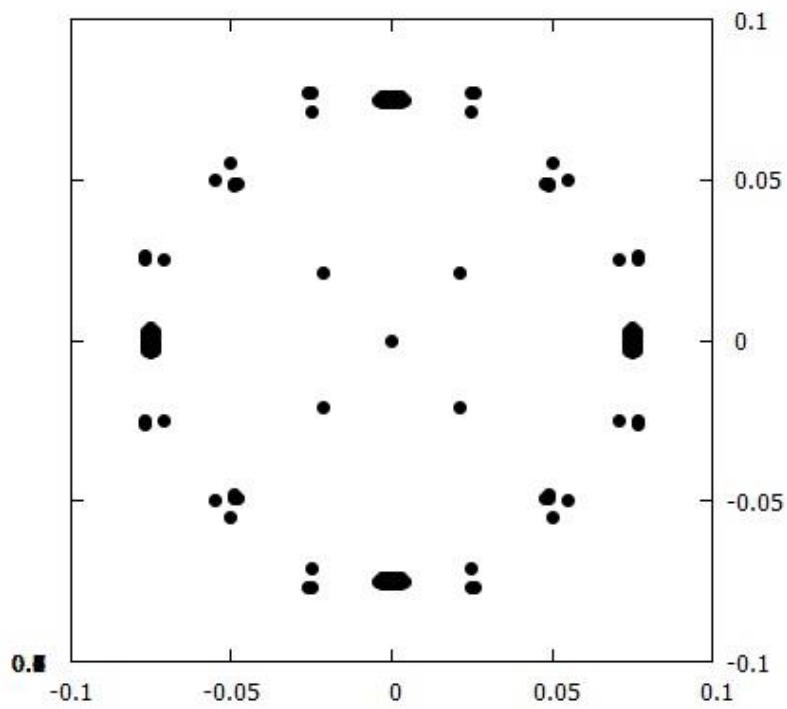


Figura 27: SC, $NQ = 10$, $ALBD = 0,2 \text{ \AA}$, $REF = 0.003$.

Uma análise com $ALBD = 0,4 \text{ \AA}$ mostrou ainda maior focalização, maior detalhamento, tomado sobre o centro do diagrama, como mostramos na figura 28 abaixo.

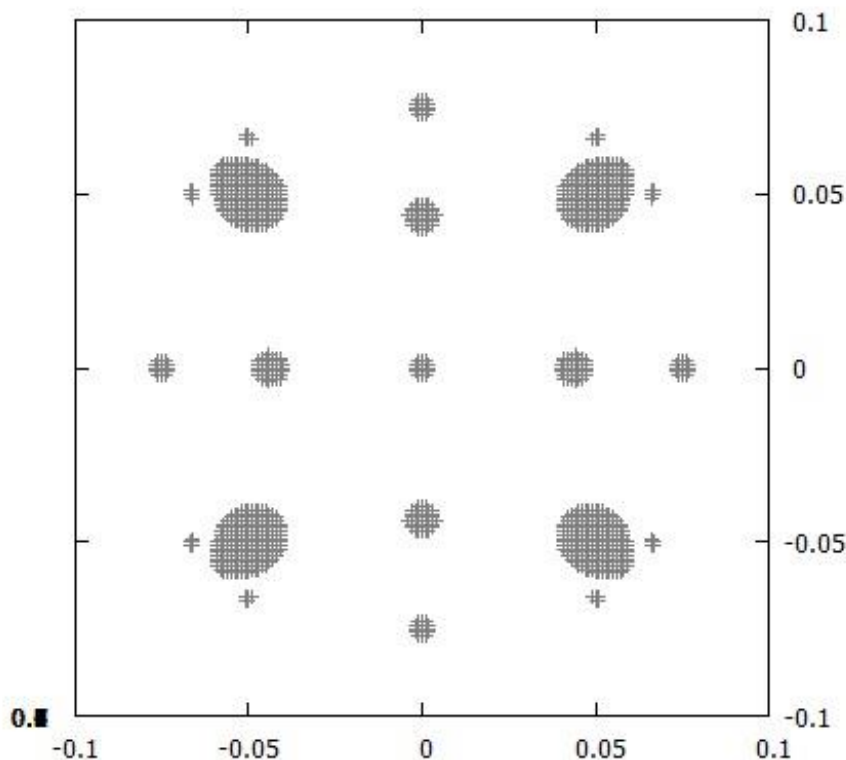


Figura 28: SC, NQ=2, ALBD=0,4 Å, REF=0,03.

Embora não tenhamos encontrado na literatura da área nenhum Lauegrama correspondente à rede cúbica simples, podemos comparar nossos resultados com os do programa LauePt (de *Laue Pattern*, ou padrão de Laue), criado por pesquisadores da Universidade Stony Brook, New York, USA [12]. Estes são exibidos na figura 29. Os parâmetros ZL (distância cristal-anteparo) e dimensões do anteparo foram escolhidos iguais aos nossos, porém o tamanho da célula foi adotado como $DIST = 4 \text{ \AA}$; comprimentos de onda do LauePt variam com as várias manchas, sendo que neste caso (para esta intensidade referencial adotada no programa LauePt) pode-se dizer que é próximo de $0,8 \text{ \AA}$. Isto corresponde, no nosso caso, a $ALBD = 0,2 \text{ \AA}$, já que o relevante em tais cálculos é a razão $DIST / ALBD$ que aparece no expoente das exponenciais, ikr sendo que $k=2\pi/\lambda$ e r tem dimensões de $DIST$.

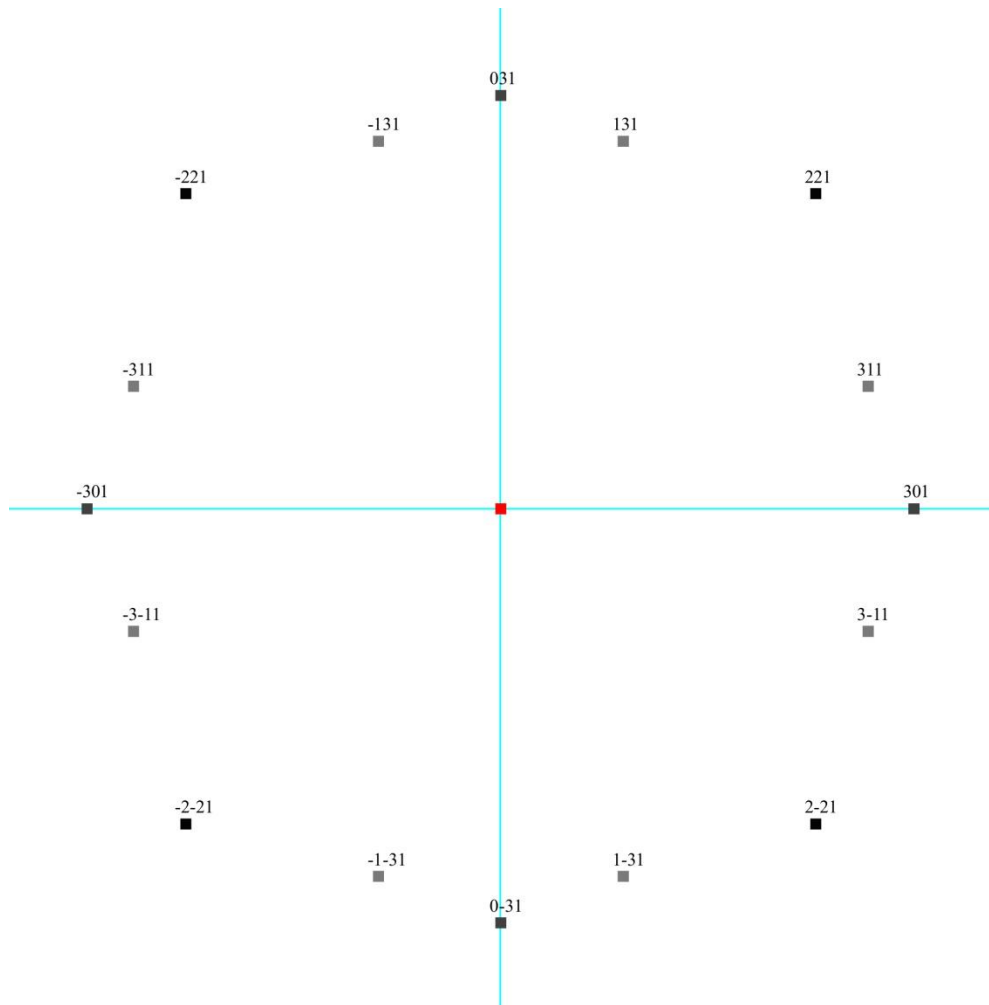


Figura 29: Simulação para rede SC do programa LauePt.

Comparando então com a figura 26 ou 27, vemos semelhanças com pontos do “primeiro anel” mostrado. Mas a concordância não é completa. O motivo é que o LauePt é um *software* (bem) mais sofisticado, levando em conta por exemplo o fator de estrutura para o átomo específico considerado, o que é implementado através de um modelo semi-empírico, enquanto que nosso modelo simplificado considerou um efeito global de espalhamento radialmente simétrico para cada átomo.

5.5 Rede do Diamante

Na estrutura cúbica simples SC que simulamos (seção anterior, 5.4), os átomos encontravam-se nos vértices do cubo. Na rede cristalina FCC, cúbica de face centrada, além destes átomos dos vértices, estão posicionados na

célula cúbica (chamaremos “célula convencional”; não confundir com a célula unitária) outros seis átomos, nos centros das seis faces do cubo. O caso FCC foi estudado por outra estudante do grupo, que havia encontrado ótimos resultados. Havendo dados experimentais (Lauegramas) disponíveis para a estrutura do diamante, decidimos efetuar as simulações da difração e da rede para este tipo de sólido.

O posicionamento dos átomos na estrutura do diamante pode ser entendido da seguinte forma. Partimos de uma rede FCC, com os oito átomos nos vértices e seis átomos nos centros das faces do cubo (célula convencional). Para *cada* átomo desses, acrescentamos um outro átomo, a uma distância um quarto da diagonal principal, na direção dessa diagonal. A diagonal principal coincide com o que se costuma chamar direção 111, ou seja na direção do vetor

$$\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}$$

(soma dos versores dos eixos x, y e z).

Portanto, pode-se dizer que a estrutura do diamante é uma superposição de duas estruturas FCC, deslocadas uma em relação à outra pelo vetor

$$(\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}) \cdot a / 4$$

com a sendo a aresta do cubo.

Utilizamos o programa DifraDia.f, que foi desenvolvido a partir do programa DifraFcc.f; executamos a rotina para variados comprimentos de onda, desde um décimo do parâmetro de rede a , até $ALBD = a$. Para cada comprimento de onda, analisamos a dependência do resultado com o número de átomos considerado (o “tamanho” do cristal, definido por NQ).

Chegamos a conclusões semelhantes às aquelas do caso SC: em termos gerais, as figuras de difração simuladas vão evoluindo com o aumento de NQ, de modo que na região central reste uma mancha apenas (o máximo central), ao redor dela um primeiro anel, sendo que para comprimentos de onda menores, um segundo anel também é “visível”.

Apresentamos nas figuras 30, 31 e 32 algumas simulações da difração de raios X pelo silício, correspondentes aos valores dois, cinco e dez para NQ. O número de átomos, por exemplo para $NQ = 10$, é de 66.461. O parâmetro de

rede no caso do silício é de $5,43 \text{ \AA}$, de modo que o comprimento de onda utilizado neste caso foi de $0,543 \text{ \AA}$.

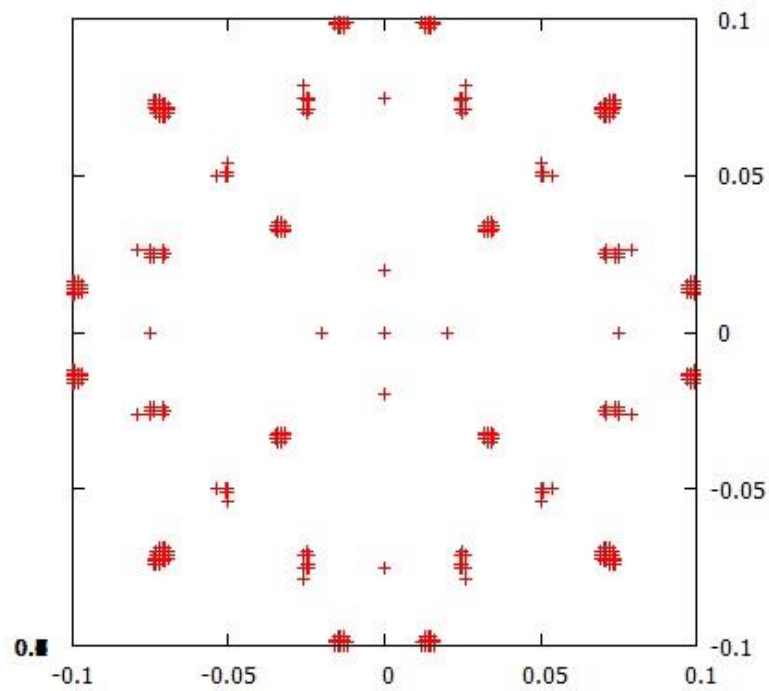


Figura 30: Silício, $NQ=2$, $ALBD=0,543 \text{ \AA}$, $REF=0,01$.

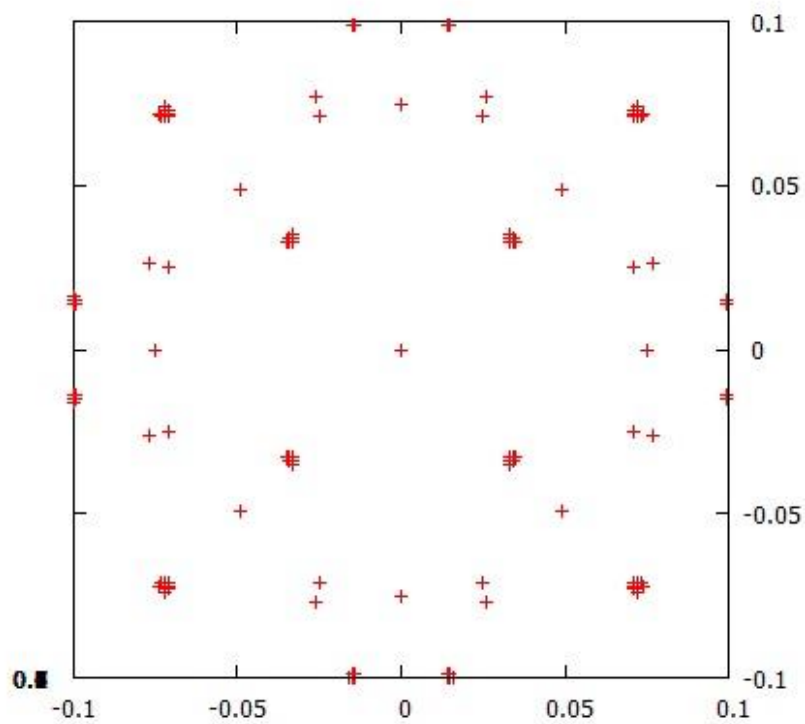


Figura 31: Silício, $NQ=5$, $ALBD=0,543 \text{ \AA}$, $REF=0,005$.

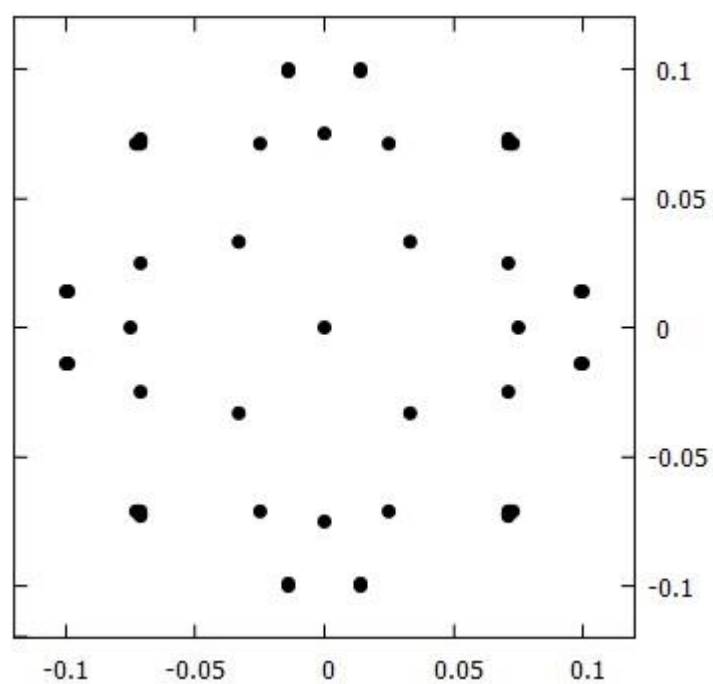


Figura 32: Silício, $NQ=10$, $ALBD=0,432 \text{ \AA}$, $REF=0,001$.

Compare-se com um diagrama experimental para o silício, visto na figura

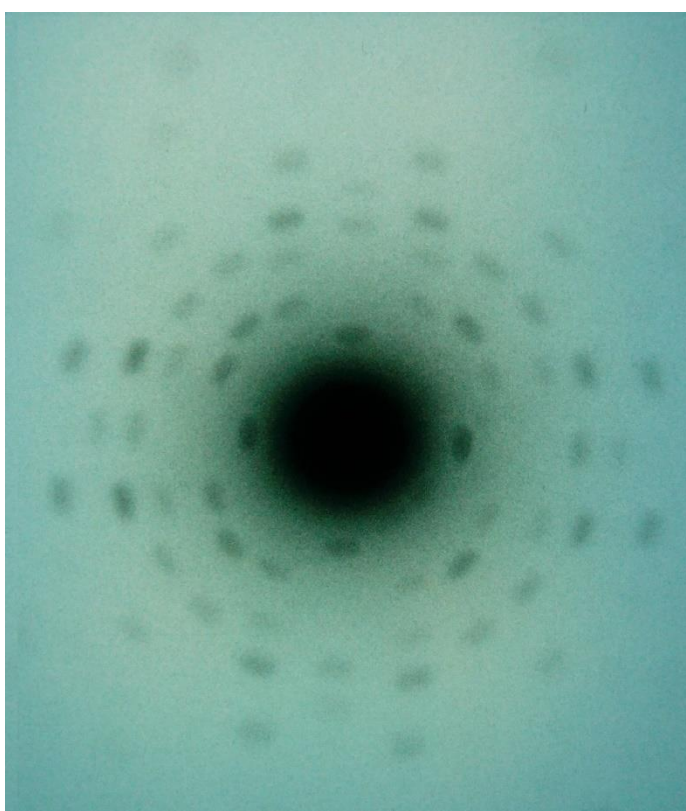


Figura 33: Padrão de Laue para o silício.

33 (de <http://physicsopenlab.org/2018/01/18/laue-diffraction/>). Apesar deste diagrama estar girado (de 45°), observamos a boa correspondência entre os pontos formando um quadrado ao redor da mancha central em nossa figura de difração, e também os pontos do “primeiro anel” consistindo de quatro conjuntos de três manchas, e os dois pontos acima delas, dentre outras coincidências.

A comparação de nossa simulação com o padrão de Laue gerado pelo programa LauePt também é animadora (figura 34).

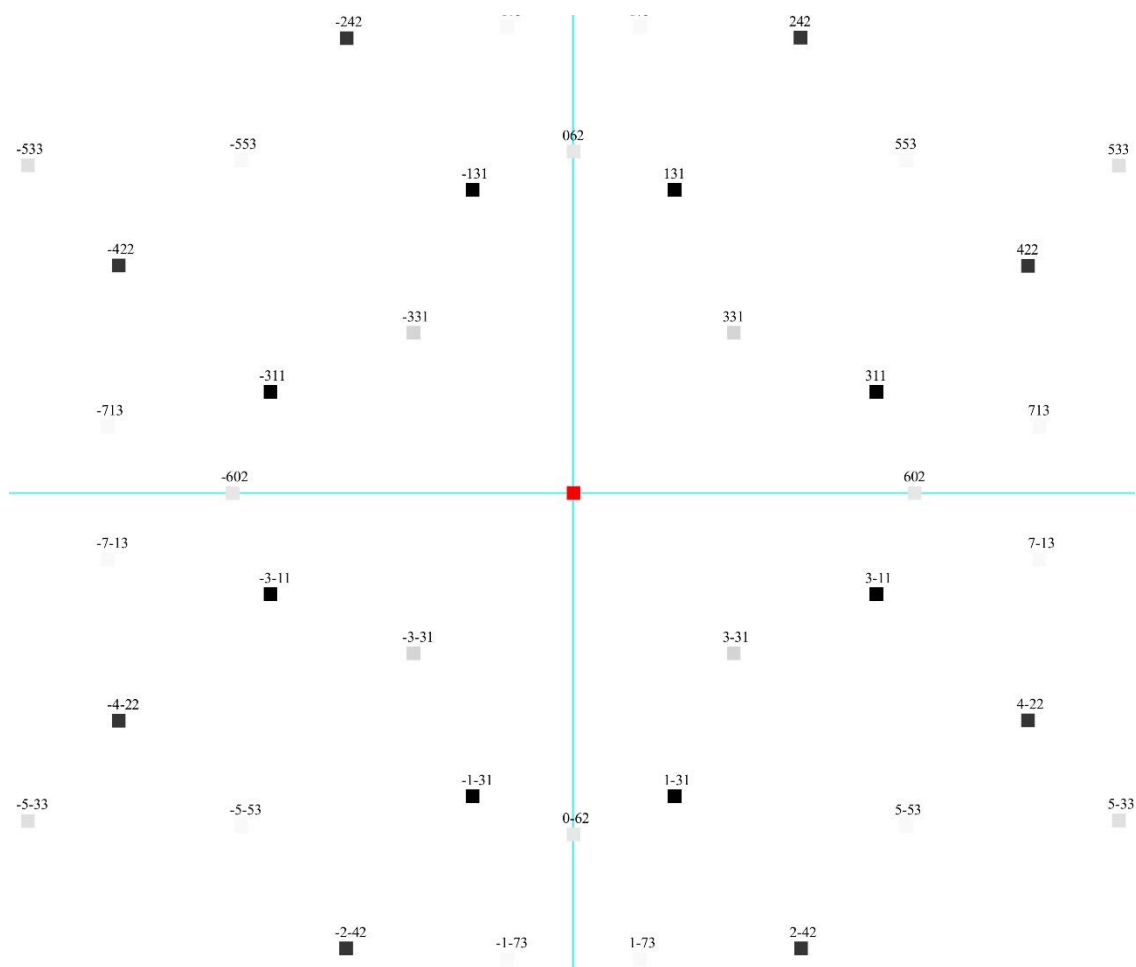


Figura 34: Simulação da difração de Laue do silício, programa LauePt.

Na comparação com nossa simulação da figura 32, parece-nos haver correspondência entre os pontos do quadrado (de índices $[331]$, $[-331]$, $[-3-31]$, $[3-31]$), também os do quadrado mais externo ($[553]$ e outros), e a estrutura que nos parece um primeiro anel ($[311]$, $[602]$, $[3-11]$ e outros três conjuntos

simétricos), bem como os dois pontos mais externos à essa estrutura ([713] e [7-13] e simétricos).

Ao aumentarmos o valor ALBD do comprimento de onda da radiação X incidente, observamos o mesmo efeito comentado para a rede SC, ocorre uma espécie de *zoom* ou “focalização”, sendo destacada e um pouco mais detalhada a região central da figura de difração. Como exemplo, mostramos na figura 35 o caso $ALBD = 2$, $a = 0,864 \text{ \AA}$.

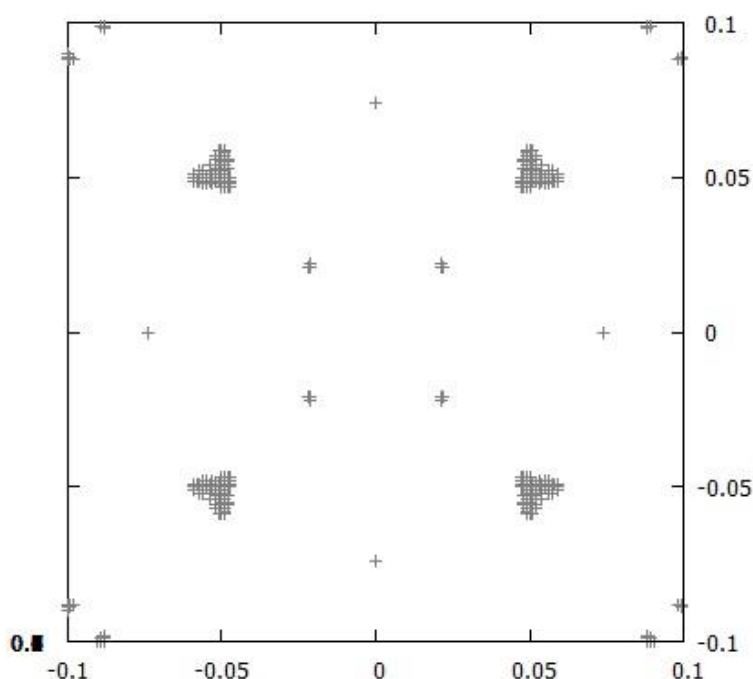


Figura 35: Silício, NQ=5, ALBD=0,864 Å, REF=0,001.

Simulamos também, para o silício, a figura de difração na direção 111, ou em outras palavras, posicionando o cristal de modo que seu plano (111) seja atingido perpendicularmente pelo feixe de raios X.

A visão que se tem do cristal de silício, visto a partir dessa direção 111, é mostrada na figura 36.

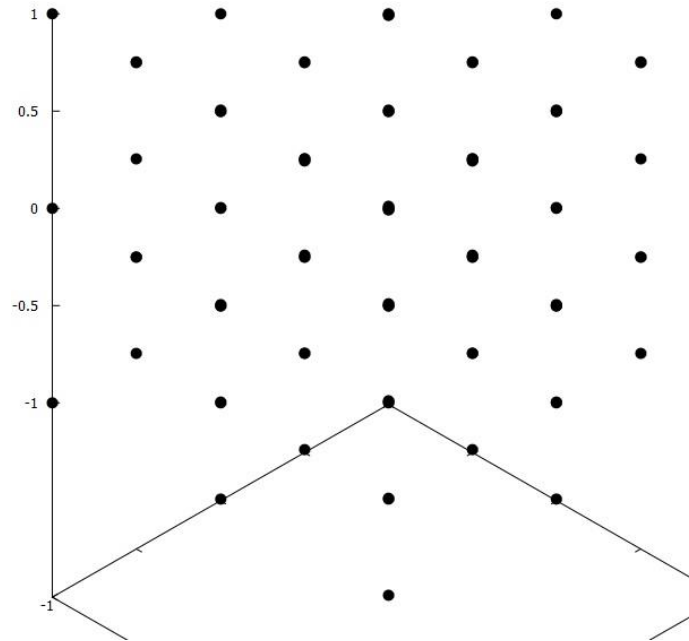


Figura 36: Vista da rede do diamante a partir da direção 111.

Uma subrotina específica efetua a rotação de coordenadas para cada ponto do cristal, antes de calcular sua contribuição (a fase da onda espalhada por esse átomo). Se as coordenadas antigas eram $X1$, $Y1$, $Z1$, as novas coordenadas, escolhidas de modo que o novo eixo z esteja orientado na direção do vetor

$$\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}$$

são dadas por:

$$X2 = (1/\sqrt{2}) * X1 - (1/\sqrt{2}) * Y1$$

$$Y2 = (1/\sqrt{6}) * X1 + (1/\sqrt{6}) * Y1 - (2/\sqrt{6}) * Z1$$

$$Z2 = (1/\sqrt{3}) * X1 + (1/\sqrt{3}) * Y1 + (1/\sqrt{3}) * Z1.$$

Com esta alteração construímos o programa DifraDia2.f, obtendo para $NQ=5$ e $ALBD=0,543 \text{ \AA}$ o padrão de difração apresentado na figura 37.

Comparamos nossa simulação com um padrão de Laue experimental (figura 38, extraído de Lima, [11]). O acordo encontrado, neste caso, é excelente, embora nossa figura de difração não mostre todas as manchas de Laue que aparecem no diagrama experimental.

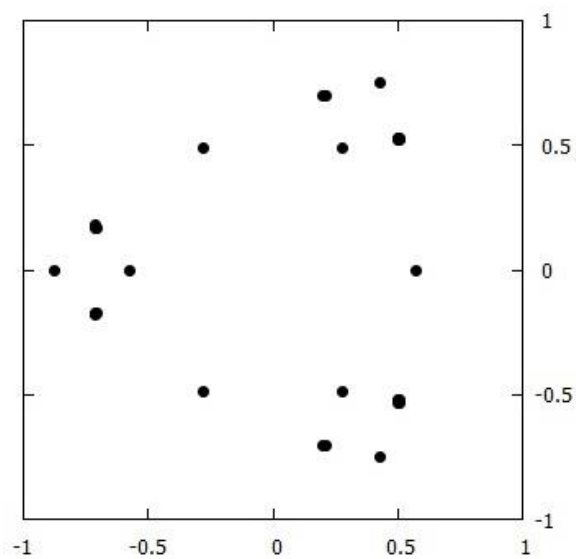


Figura 37: Simulação do padrão de Laue, direção 111.

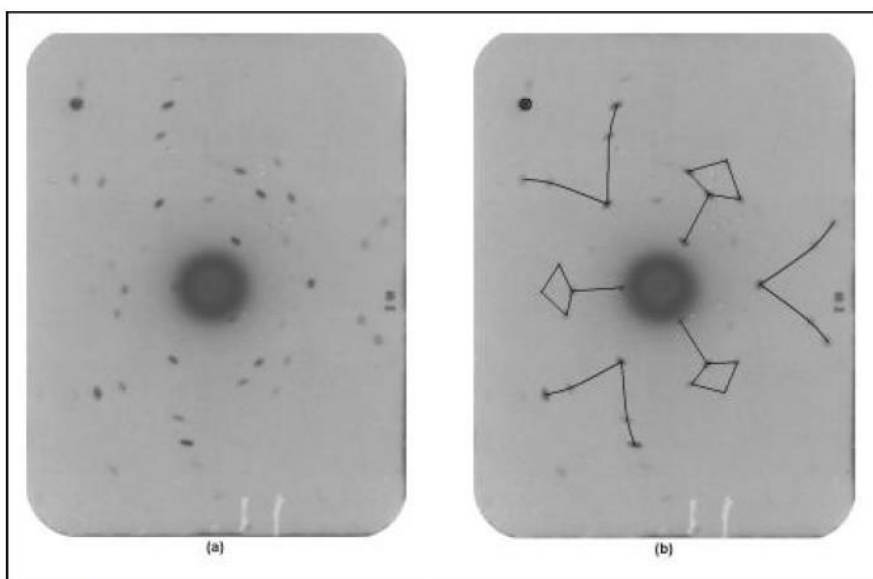


Figura 5.3: (a) Imagem digitalizada do lauegrama do Si<111>. (b) Lauegrama idêntico, mas foram feitos traços para melhor visualização da simetria.

Figura 38: Simulação (programa LauePt) do silício, direção 111.

6. Resultados e Discussão da Simulação de Rede Cristalina a Partir de Figuras de Laue

Nesta parte do trabalho efetuamos o procedimento inverso aos das seções anteriores: já que pudemos, partindo da rede cristalina, recriar as figuras de difração de Laue usando as transformadas de Fourier, então seria possível por meio das transformadas inversas de Fourier recriar a rede cristalina a partir das figuras de Laue. O programa Rede.f implementa tal transformada inversa, partindo de um simples conjunto de pontos (manchas de Laue) selecionados (“fig_laue.dat”). Ao executar o programa Rede.f, é gerado um arquivo de saída (rede.dat) com as densidades eletrônicas $n(\mathbf{r})$ para cada ponto x, y, z . Como esse arquivo de dados possuía um tamanho típico de um gigabyte, elaboramos pequeno programa para filtrar o arquivo de dados (Filtro.f) deixando apenas os pontos com intensidade acima de um certo valor de referência REF.

No caso da rede cúbica simples, como não dispúnhamos de padrões de Laue experimentais, usamos nossa própria simulação obtida na primeira parte deste trabalho (parâmetro de rede: 1 Å).

Uma primeira simulação, considerando o padrão de Laue com 21 pontos (exibidos na figura 39; correspondem ao “primeiro anel”), deu indícios da presença dos átomos, mas não foi possível escolher um valor conveniente REF para exibir um conjunto simulado “visível” de átomos expressando as simetrias da rede SC.

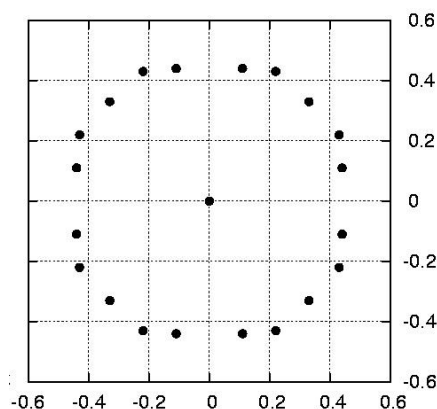


Figura 39: Padrão de Laue usado como input (21 pontos) para a reconstrução da rede.

Obtivemos sucesso, em seguida, ao considerarmos um número maior de pontos do padrão de difração, o que foi conseguido ajustando os parâmetros que definem o tamanho do anteparo. Os 45 pontos considerados estão exibidos na figura 40; o tamanho do anteparo foi colocado como uma unidade.

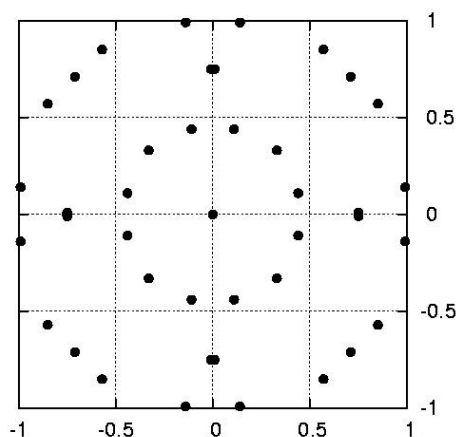
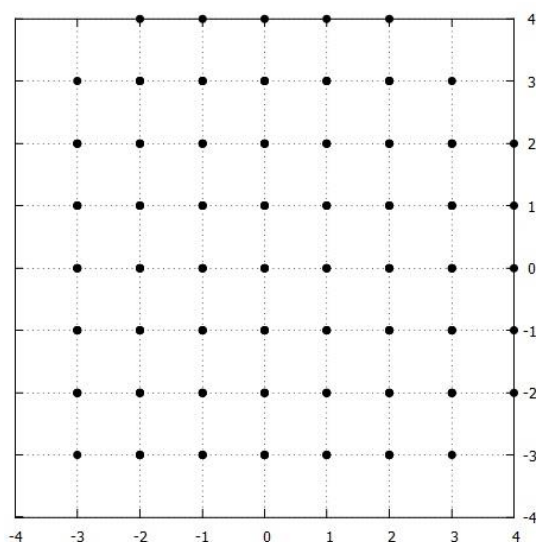


Figura 40: Padrão de Laue usado como input (45 pontos) para a reconstrução da rede.

Exibimos nas figuras 41 a 44 a rede reconstruída na simulação, observada desde alguns pontos de vista. Os pontos exibidos (que representam, neste contexto, os átomos, em seus sítios) correspondem a valores da densidade eletrônica $n(\mathbf{r})$ iguais ou superiores a $REF = 0,8$.



*Figura 41: Rede cristalina SC reconstruída a partir do diagrama de Laue.
Vista a partir do eixo z (direção de incidência dos raios X).*

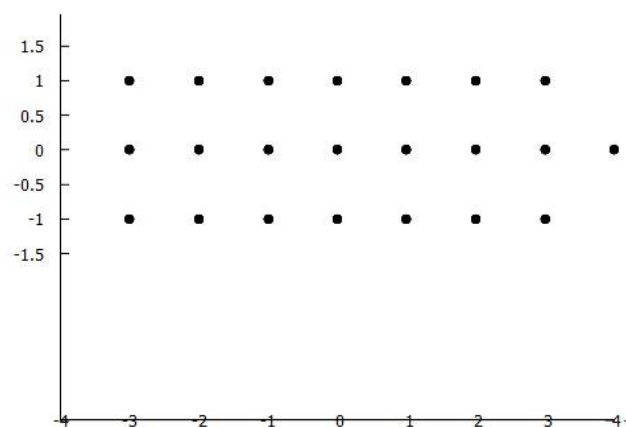


Figura 42: Rede cristalina SC reconstruída; vista a partir do eixo y.

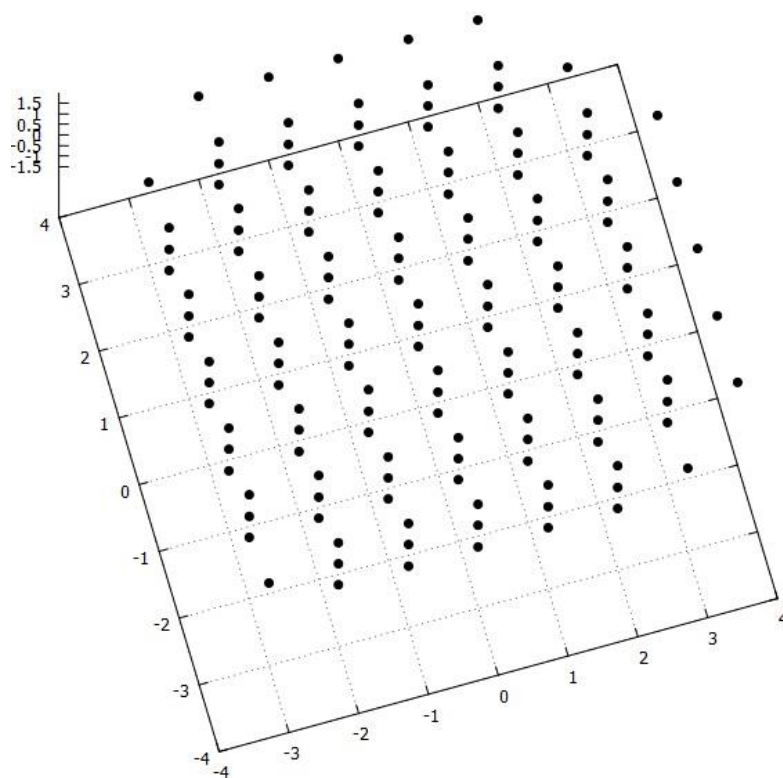


Figura 43: Rede cristalina SC reconstruída; vista em perspectiva (3D).

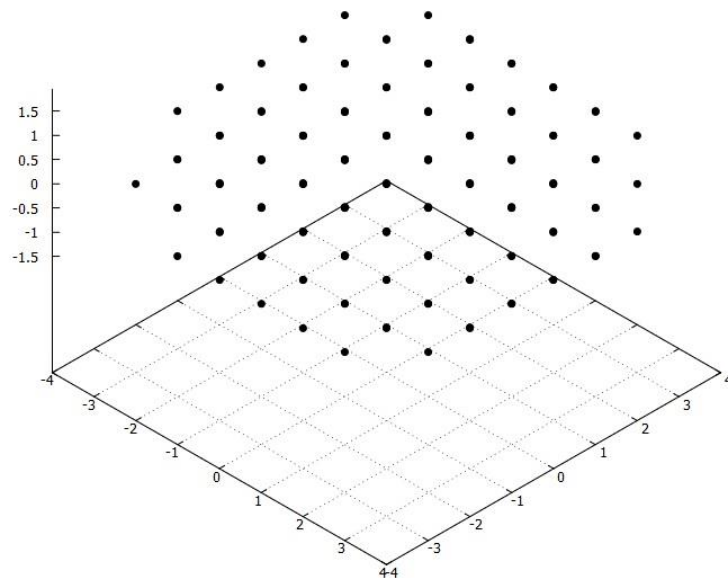


Figura 44: Rede cristalina SC reconstruída; vista da direção 111.

A visualização da rede cristalina simulada não deixa margem a dúvidas, trata-se de fato da rede SC.

Inúmeras tentativas de reconstrução, por nós efetuadas *até o momento*, com vistas a reconstrução da rede do *diamante* não levaram a um resultado completamente conclusivo: a rede simulada possui um aspecto de FCC, com dimensões corretas para o tamanho da célula convencional, mas apenas alguns dos átomos adicionais (distantes um quarto da diagonal, colocados na direção da diagonal principal) aparecem nas simulações. Tentamos variadas configurações, com 17, 33, 53, 67, 105, 201 e 273 pontos ou manchas de Laue, tomados de diagramas experimentais, ou os do programa LauePt, ou mesmo de nossas próprias simulações. A sensação que temos é de que o conjunto de pontos tomado ainda é insuficiente para recriar pelo menos uma porção central do cristal apresentando as simetrias adequadas da rede do diamante. Observamos que já havia sido tratado, com a mesma metodologia, o caso da rede FCC [13], que apresentou ótimos resultados preliminares tanto para a simulação da difração de Laue como para a reconstrução da rede cristalina.

7. Conclusões

Neste trabalho, empregamos um modelo simples da difração de raios X por átomos de um cristal para simular a formação dos padrões de Laue. A hipótese básica foi considerar cada átomo como uma fonte secundária pontual, emitindo ondas esféricas com o mesmo comprimento de onda da radiação incidente. A interferência das ondas provenientes de cada átomo da estrutura cristalina considerada gerava um padrão de Laue simulado, que pudemos comparar com diagramas experimentais e/ou com simulações de outras rotinas computacionais.

Tratamos dos casos do espalhamento do feixe incidente de raios X por dois átomos, e por um conjunto de N átomos alinhados, exibindo a intensidade simulada em cada ponto do anteparo, obtendo resultados compatíveis com aqueles mostrados em textos de física básica. Uma grade bidimensional de átomos foi simulada a seguir, também apresentando bons resultados.

A simulação da difração de raios X por um cristal com estrutura cúbica simples (SC) foi efetuada, o padrão encontrado apresentou corretamente as simetrias daquela rede. Não dispondo de diagramas de Laue experimentais para este tipo de cristal, efetuamos a comparação com padrões de Laue da rotina LauePt (SUNY), em acordo razoável com nossas simulações.

Simulamos a difração de Laue pela rede tipo diamante, e nossos resultados compararam muito bem com diagramas experimentais e também com os padrões do LauePt. Em particular, conseguimos excelente reprodução do diagrama formado com o cristal girado na direção 111.

Efetuamos também a simulação reversa: partindo de padrões de Laue simulados, reconstruímos com sucesso a rede cristalina no caso de um cristal SC, partindo de um cálculo numérico envolvendo a transformação inversa de Fourier.

8. Referências Bibliográficas

- [1] TIPLER, P A. Física Moderna. Rio de Janeiro: Guanabara 2, 1981.
- [2] EISBERG, R., RESNICK, R. Física Quântica. Rio de Janeiro: Campus, 1979.
- [3] SOUZA, A.M.C. Simulação Computacional da Difração de Raios X por Cristais. 1988. Iniciação Científica. Universidade Federal de Sergipe, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Orientador: Osmar de Souza e Silva Júnior (trabalho não publicado; relatório final disponível).
- [4] RESNICK, R. Fundamentos de Física, V.4, Ótica e Física Moderna. Rio de Janeiro: LTC, 2016.
- [5] CRAWFORD JR., F. S. Ondas. Curso de Física de Berkeley, Vol. 3. Barcelona: Reverté, 1979.
- [6] KITELL, C. Introdução à Física do Estado Sólido. Rio de Janeiro: Guanabara 2, 1978.
- [7] ASHCROFT, N.W., MERMIN, N.D. Solid State Physics. N. York: Holt, Rinehart and Winston, 1976.
- [8] De <http://slideplayer.com.br/slide/363770/>, Difração de raios X. Sérgio Pezzin.
- [9] BRAGG, W. L. The Structure of Some Crystals as Indicated by their Diffraction of X-rays. Proc. R. Soc. Lond. A 89 (1913) 248-277.
- [10] HEHL, M. E. Fortran 77, Linguagem de Programação Estruturada. São Paulo, Mc Graw Hill, 1986.

[11] LIMA, S.C. Estudo da Técnica de Difração de Raios X. Trabalho de Conclusão de Curso de Bacharelado em Física, Universidade Estadual de Feira de Santana, 2006. Orientador: Prof. Dr. Jorge R. A. Kaschny.

[12] LAUEPT, rotina computacional disponível no *Collaborative Computational Project Number 14* (CCP14),

<http://www.ccp14.ac.uk/ccp/web-mirrors/xianrong-huang/>.

[13] RAMOS, C. P. Simulação de rede cristalina a partir da transformada inversa de Fourier de figuras de difração de Laue. Trabalho de Conclusão de Curso de Bacharelado em Física. Universidade Federal de Sergipe, 2017 (não concluído). Orientador: Osmar de Souza e Silva Júnior.